topspin

Bruker BioSpin

3.0 中文導覽手冊

流程式使用者介面

(Flow User Interface)

磊葳科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

目錄

第一章 TopSpin 介面 (The TopSpin Interface) 3

1-1. 介面類型與轉換 3

1-2. 子視窗切換鍵 5

1-3. 工具列 5

1-4. 命令列 8

1-5. 狀態列 8

1-6. 檔案瀏覽器 9

1-7. NMR 檔案結構 12

1-8. 檔案管理流程按鍵 15

第二章 光譜收集 (Data Acquisition) 16

2-1. 實驗設定流程按鍵 16

2-2. 收訊功能鍵 18

2-3. 指令之佇列、定時與排程執行 19

2-4. 氘鎖定視窗 26

2-5. BSMS 控制視窗 26

第三章 光譜處理 (Data Processing) 28

3-1. 手動處理光譜 28

3-2. 光譜處理流程按鍵 28

第四章 光譜介面 (Spectrum Display) 31

4-1. 1D 光譜介面 31

4-2. 2D 光譜介面 40

4-3. 3D 光譜介面 42

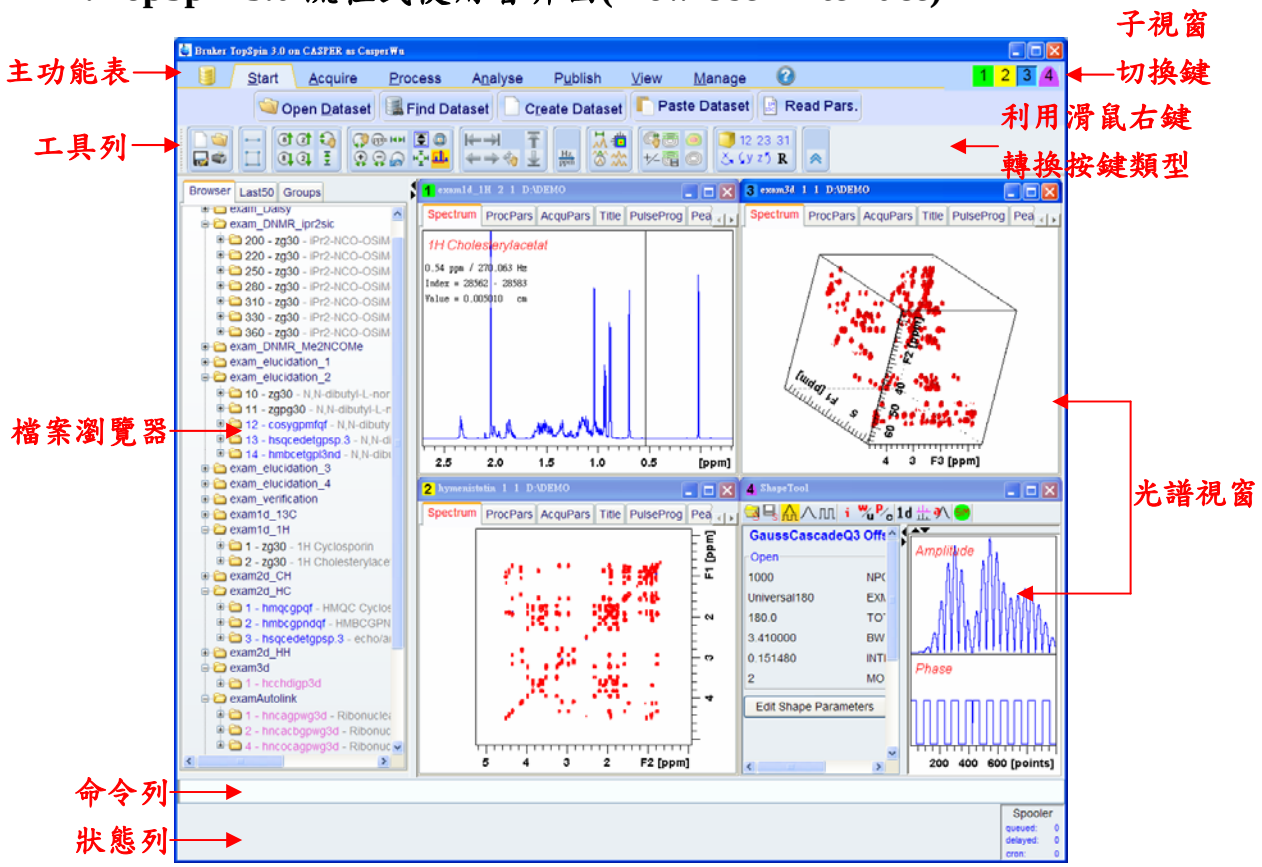
第五章　1D 光譜處理操作 (1D Interactive Manipulation) ····· 45
5-1. 即時視窗函數調整功能 ····· 45
5-2. 光譜處理 ····· 46
第六章　2D 光譜處理操作 (2D Interactive Manipulation) ····· 57
第七章　列印/輸出 (Printing/Exporting Data) ····· 70
7-1. 使用 Plot 頁面進行光譜列印····· 70
7-2. 光譜列印 ····· 70
7-3. 光譜複製與輸出 ····· 71
7-4. 積分值與譜峰標定值之列印 ····· 72
第八章　光譜分析 (Analysis) ····· 73
8-1. 訊雜比計算 ····· 73
8-2. 重疊峰拆解 ····· 74
8-3. 偶合常數分析 ····· 77
8-4. Daisy 光譜模擬程式 ····· 86
第九章　數位定量 (Digital Eretic) ····· 89
9-1. 已知濃度樣品校正 ····· 90
9-2. 未知濃度樣品計算 ····· 90
9-3. 增加 Eretic 譜峰 ····· 91
第十章　常用指令 (Frequently Command) ····· 93

吳英彥　Casper Wu
TEL: 02-26989266-12
FAX: 02-26989267
casper@rezwave.com.tw
磊葳科技公司 (www.rezwave.com.tw)

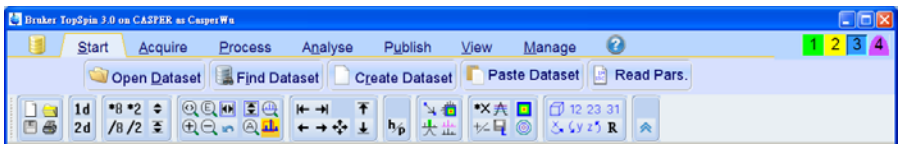
第一章 TopSpin 介面 (The TopSpin Interface)

1-1. 介面類型與轉換

1. TopSpin 3.0 流程式使用者介面(Flow User Interface)

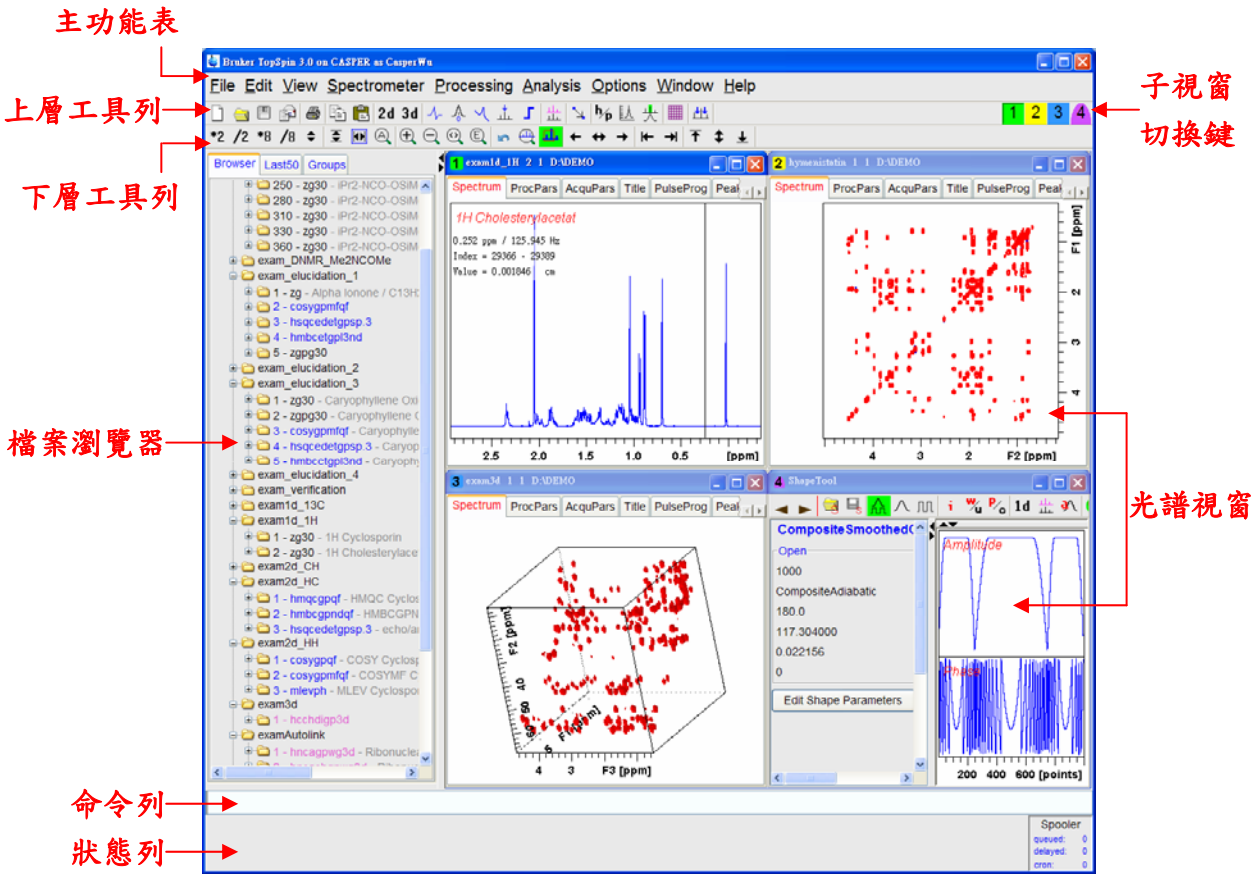


將滑鼠移至工具列右側空白處，按下右鍵並選取選單中的"Toggle Icon Style"，即可將工具列按鈕圖示更換為類似 TopSpin 2.1 之傳統式使用者介面：

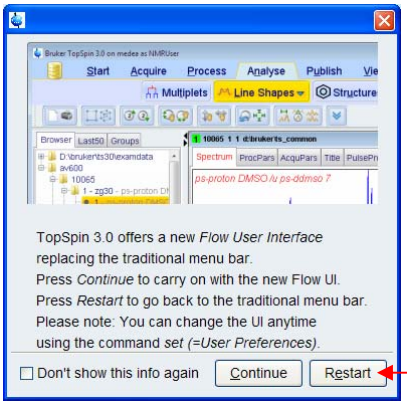


2. 傳統式使用者介面

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

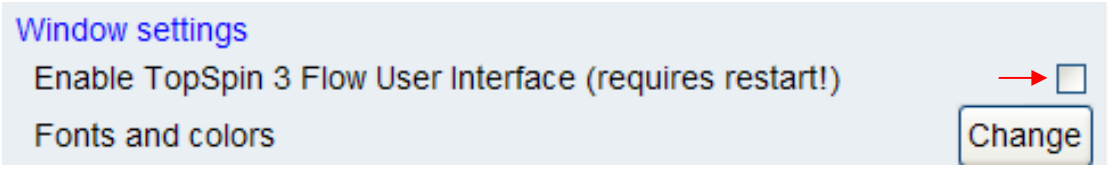


於開啟 TopSpin 3.0 後所出現的介面選擇視窗中，點選 Restart 按鍵即可更換使用者介：


TopSpin 3.0 offers a new Flow User Interface
replacing the traditional menu bar.
Press Continue to carry on with the new Flow UI.
Press Restart to go back to the traditional menu bar.
Please note: You can change the UI anytime
using the command set (=User Preferences).
Don't show this info again
Continue
Restart

或於命令列中鍵入"**set**"指令，取消選取"Enable TopSpin 3 Flow User Interface"→ Apply → Close，並重新開啟 TopSpin 3.0，即可將介面轉換為傳統式使用者介面：

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.



1-2. 子視窗切換鍵

當光譜視窗內開啟多個視窗，或其他功能視窗(如溫度控制功能)，每個子視窗左上角會有顏色與符號的小方塊作為區分，按下小方塊即可切換子視窗。

1-3. 工具列(中括號內為輸入指令)

展開所有的功能鍵

隱藏部分的功能鍵

1. 檔案管理鍵

建立一個新的實驗資料檔 [**edc, new**]

開啟已經存在的實驗資料檔 [**reb**]

儲存目前的實驗資料檔 [**sav**]

列印實驗資料檔 [**print**]

回到最近期的 2D 光譜 [**.2d**]

回到最近期的 3D 光譜 [**.3d**]

2. 垂直方向變化鍵

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

光譜強度比例乘 8 [***8**]

光譜強度比例除 8 [**/8**]

光譜強度比例乘 2 [***2**]

光譜強度比例除 2 [**/2**]

於此鍵上壓住滑鼠左鍵，上下拉動調整光譜強度比例

將光譜強度重設至視窗最適大小 [**.vr**]

[附註] 亦可使用滑鼠滾輪進行光譜強度調整。

3. 水平方向變化鍵

於此鍵上壓住滑鼠左鍵，左右拉動調整光譜寬度比例

出現對話框，自行設定左右邊界 [**.zx**]

將全光譜寬度重設至視窗大小 [**.hr**]

放大光譜寬度 [**.zi**]

縮小光譜寬度 [**.zo**]

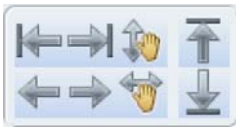
回到上一次光譜寬度範圍 [**.zl**]

以滑鼠拖曳方框方式進行放大，可同時進行垂直與水平方向之放大，按鈕呈綠色即開啟功能，再按一次即解除 [**.zoommode**]

顯示全光譜 [**.all**]

鎖定目前顯示範圍，則在開啟其他光譜時，會限定顯示鎖定時的範圍，按鈕呈綠色即鎖定，再按一次即解除 [**.keep**]

4. 水平與垂直方向移動鍵



移至光譜最左側 [**.sl0**]

移至光譜最右側 [**.sr0**]

光譜顯示向左移動 [**.sr**]

於此鍵上壓住滑鼠左鍵，左右拖曳移動光譜

於此鍵上壓住滑鼠左鍵，上下拖曳移動光譜

移至光譜最上方 [**.su**]

移至光譜最下方 [**.sd**]

5. 顯示功能鍵

切換 Hz/ppm 單位 [**.hz**]

切換 Y 軸顯示為相對高度、絕對高度或關閉顯示 Y 軸 [**.y**]

於圖譜上顯示格線 [**.gr**]

6. 互動功能鍵

進入距離量測模式

設定頻率表(具 FQLIST 參數之實驗使用)

顯示圖譜總覽(於光譜上方出現一子畫面) [**.ov**]

進入光譜重疊模式 [**.md**]

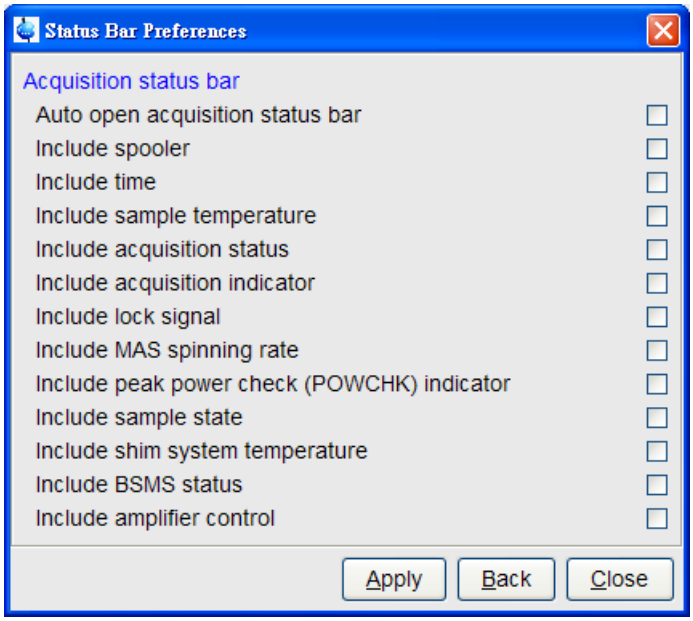
1-4. 命令列

於指令輸入欄位可使用鍵盤的↑、↓按鍵，來回搜尋輸入過的指令。或鍵入"**cmdhist**"指令，查看所有執行過的指令。

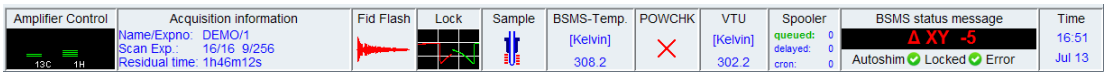
輸入"**cmdindex**"指令時，可查看所有指令，並可點擊查看說明。或直接以"**help+指令名**"查看說明。如"**help ft**"會出現"**ft**"指令說明。將指令框選後，可利用"Ctrl+x"、"Ctrl+c"、"Ctrl+v"進行指令的"剪下"、"複製"、"貼上"等功能。

1-5. 狀態列

顯示指令執行狀況及各項狀態之小視窗。將滑鼠移至狀態列的空白處，按下右鍵並選取選單中的"Status Bar Preferences"，可控制各種小視窗的開啟或關閉。



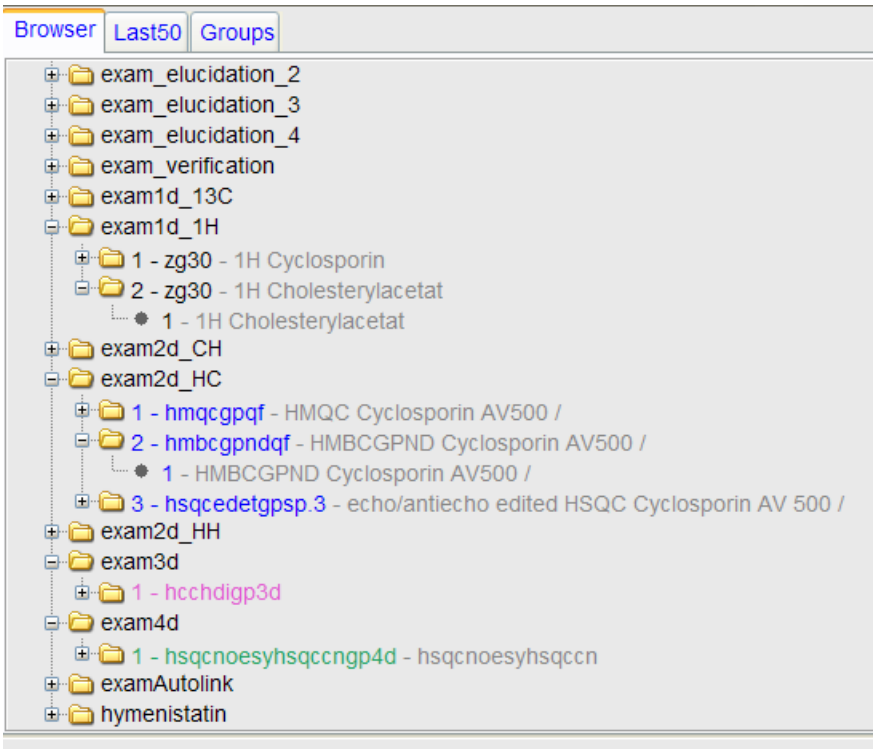
可依顯示所需，開啟其功能選項，於狀態列中會出現如下之各種小視窗：



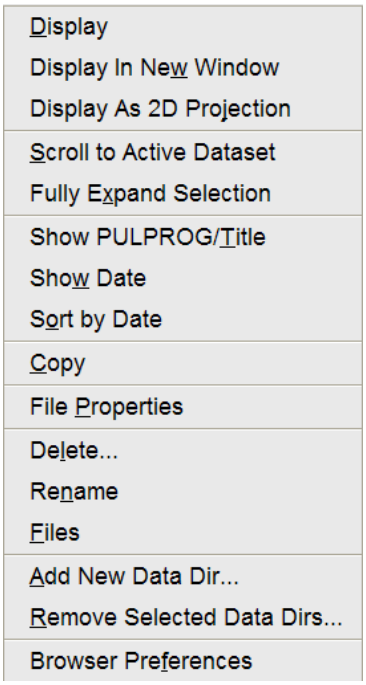
- **Spooler**：顯示佇列、定時與排程執行的指令狀態(屬於"**qu**"、"**at**"或"**cron**"類的指令才會在此區顯示)。
- **Time**：顯示今天的日期與現在的時間。
- **Sample temperature**：顯示樣品的溫度。
- **Acquisition status**：顯示實驗進行狀況及所剩的實驗時間等。
- **Acquisition indicator**：若有脈衝正在進行，則會以閃爍方式顯示紅色 FID 圖形。
- **Lock signal**：顯示小型的氘鎖定視窗。
- **MAS spinning rate**：顯示 MAS (Magic Angle Spin)的轉速(使用 CP 或 HR-MAS 探頭時才會在此區顯示)。
- **Peak power check (POWCHK) indicator**：顯示 power check 功能的開啟或關閉，如上圖表示 power check 功能已關閉。
- **Sample state**：顯示樣品所在位置，如上圖表示樣品已在探頭中。
- **Shim system temperature**：顯示勻場線圈(shimming coil)的溫度。
- **BSMS status**：顯示 BSMS 的狀態(勻場、氘鎖定等)。
- **Amplifier control**：顯示放大器的狀態。

1-6. 檔案瀏覽器

共分 Browser, Last50, Groups 三項，如下圖所示：



1. **Browser**：以樹狀結構圖表示目錄階層，於光譜資料的目錄上，以左鍵拖曳到右側光譜區即可開啟，而於頁面中按滑鼠右鍵可開啟功能選項：



- **Display**：將所選光譜顯示於目前的視窗中。

- **Display In New Window**：將所選光譜顯示於新的視窗中。
- **Display As 2D Projection**：將所選之 1D 光譜作為 2D 光譜之投影。
- **Scroll to active dataset**：顯示目前光譜所在之資料夾。
- **Fully Expand Selection**：完全展開所選光譜之樹狀結構。
- **Show PULPROG/Title**：開啟或關閉顯示脈衝程式和標題功能。
- **Show Date**：顯示光譜建立日期。
- **Sort by Date**：以光譜建立日期進行排序。
- **Copy**：複製所選光譜之存放路徑至剪貼簿中。
- **File Properties**：顯示所選光譜之實驗屬性內容。
- **Delete...**：刪除所選之光譜資料。
- **Rename**：將所選之光譜資料重新命名。
- **Files**：顯示所選光譜資料所含之檔案。
- **Add New Data Dir...**：在"Browser"頁面中新增資料夾。
- **Remove Selected Data Dirs...**：移除"Browser"中所選之資料夾。
- **Browser Preferences**：Browser 的顯示設定。

1.1 利用不同顏色顯示不同維度之光譜

- **黑色**為一維光譜。
- **藍色**為二維光譜。
- **洋紅色**為三維光譜。
- 綠色為四維以上之光譜。

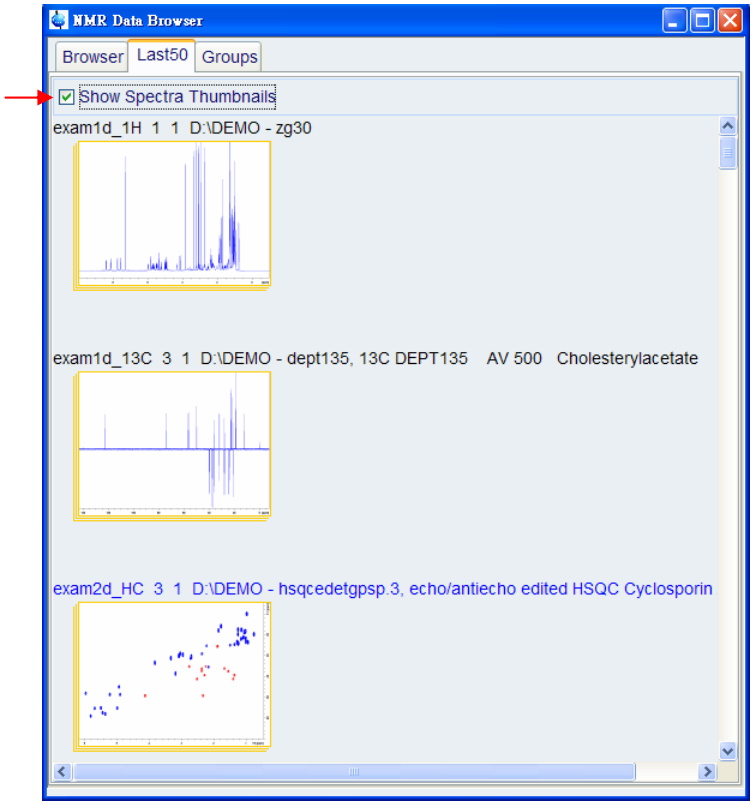
1.2 顯示每一個檔案所使用的脈衝程式與標題(title)

- 實驗序號(EXPNO)會顯示脈衝程式(如檔案瀏覽器範例圖之 zg30, hmqcgpqf, hcchdigp3d)與實驗標題(如檔案瀏覽器範例圖之 1H Cholesterylacetat, HMBCGPND Cyclosporin AV500)。

- 圖譜處理序號(PROCNO)會顯示實驗標題。

2. Last50：顯示最近開啟過的 50 個光譜之實驗名稱、編號等。

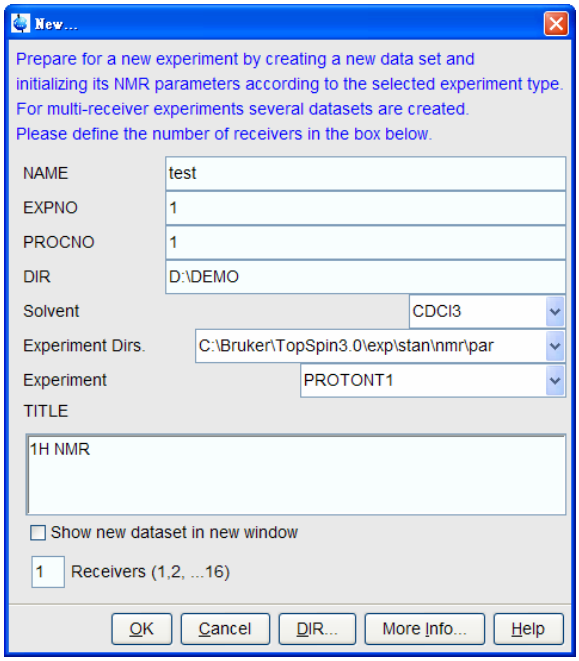
若選取頁面中的"Show Spectra Thumbnails"選項，則光譜將以圖形顯示：



3. Groups：為光譜建立群組，可將相關光譜設為一群。於 Groups 頁面按右鍵，選擇"Add new Dataset Group"，輸入一個群組名(必須以英文字母開頭)，再將相關光譜加入此群組中。

1-7. NMR 檔案結構

NMR 的檔案儲存位置具有一定規則，是依據開啟新檔案時的設定。當要開啟新檔案時，可鍵入"**edc**"指令或按下 按鍵即可開啟如下視窗：



其中 NAME、EXPNO、PROCNO 和 DIR 與檔案儲存路徑有關，檔案儲存路徑為：

<DIR>\<NAME>\<EXPNO>\PDATA\<PROCNO>

依上圖所示，其檔案結構為：

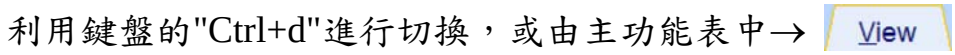
D:\DEMO\test\1\PDATA\1

其中 PDATA 為既定出現之檔案結構，而其他各項設定的意義為：

- **DIR**：此為檔案儲存時最基本的目錄，但不一定設為磁碟的根目錄，亦可設定為某一個資料夾，例如可將實驗室或群組的代號設定於此參數中，便於實驗室或群組之間的區分，例如：
  D:\LABNAME
- **NAME**：一般設定為樣品名稱、編號或日期編號，主要做為樣品之間的區分。
- **EXPNO**：必須設為數字，可設定之範圍為 1～999999999，一般做為同一樣品不同實驗之間的區分，例如 EXPNO＝1 為氫光譜，EXPNO＝2 為碳光譜的區分方式，而所收集到的 NMR 資料(如 FID)將會儲存於此資料夾下。

● **PROCNO**：必須設為數字，可設定之範圍為 1 ~ 999999999，主要做同一實驗不同處理方式的區分，如相同的 FID 但使用不同視窗函數處理光譜時，便可設定於不同之 PROCNO，而處理後的 NMR 資料將會儲存於此資料夾下。

◎如何 開啟/關閉 檔案瀏覽器?

利用鍵盤的"Ctrl+d"進行切換，或由主功能表中→  → → "Toggle Browser Window"進行切換。

◎如何在檔案瀏覽器關閉顯示脈衝程式和標題?

在"Browser"頁面中按右鍵，選擇"Show PULPROG/Title"。

◎如何在檔案瀏覽器顯示檔案建立日期?

在"Browser"頁面中按右鍵，選擇"Show Date"。

◎如何以檔案建立日期在檔案瀏覽器中排序?

在"Browser"頁面中按右鍵，選擇" Sort by Date"。

◎如何以多重視窗的方式開啟多個光譜?

在"Browser"頁面中選擇一個要開啟的 EXPNO 檔案，於檔案上按滑鼠右鍵，選擇"Display in New Window"，則選擇的光譜將以新視窗開啟，並可用子視窗切換鍵進行視窗切換，亦可由主功能表的"Window"中選擇多重視窗的排列方式。

◎如何在"Browser"頁面中新增資料夾?

在頁面中按右鍵，點選"Add New Data Dir..."，僅要輸入<DIR>的路

徑即可增加新的資料夾，但此資料夾中需先有 NMR 的資料存在，才可於檔案瀏覽器中顯示檔案。

◎如何將複製光譜資料檔案?

將光譜開啟後，於命令列輸入"**expl**"會開啟一個 Winodws 的檔案總管視窗，並且開啟的路徑於"PROCNO"中，當要複製資料時，則複製"NAME"的資料夾，即可將此樣品的所有資料加以複製。

1-8. 檔案管理流程按鍵

點選主功能表中的 Start 頁面，下方會顯示檔案管理流程按鍵，如下圖：

1. **Create Dataset** [**edc**, **new**]：建立一個新的實驗資料檔。
2. **Find Dataset** [**find**]：找尋實驗資料檔。
3. **Open Dataset** [**reb**]：開啟已經存在的實驗資料檔。
4. **Paste Dataset**：將 Browser 中"Copy"功能選項所複製的光譜顯示於光譜視窗中。
5. **Read Pars.** [**rpar**]：讀取已儲存的實驗參數設定檔。

第二章 光譜收集 (Data Acquisition)

以下介紹在 TopSpin 中實驗設定與訊號收集的操作介面。關於詳細的實驗設定參數，請參閱"Acqu. Commands & Parameters" (由主功能表 → → "Manuals"中選取)。

2-1. 實驗設定流程按鍵

點選主功能表中的 Acquire 頁面，下方會顯示實驗設定流程按鍵，如下圖：

滑鼠移至按鍵時，按鍵會變為黃色，並會出現此按鍵的相關說明，當按鍵與開啟選單的按鍵顯示相同的黃色時，如 Sample，表示此按鍵僅有選單中的功能；而當開啟選單的按鍵顯示較深的黃色時，如 Go，表示此按鍵除具有選單中的功能外，按鍵本身亦有功能。

1. Sapmle：

- Turn on sample lift air [**ej**]：將樣品從磁鐵中取出。
- Turn off sample lift air [**ij**]：將樣品置入磁鐵中。
- Control sample temperature [**edte**]：顯示並可設定控溫器的溫度。

2. Lock [**lock**]：選擇樣品所加入的 D-solvent 進行鎖定。

3. Tune [**atma**]：自動對 ATM 探頭進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整。

- Tune/match ATM probe manually [**atmm**]：於電腦螢幕上對 ATM

探頭進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整。

- Display wobble curve [**wobb**]：調整 Match/Tune 以達到訊號最佳共振點[註一]。

4. Spin：

- Turn sample rotation on [**ro on**]：旋轉樣品。
- Turn sample rotation off [**ro off**]：停止旋轉樣品。
- Change sample rotation rate [**ro**]：設定樣品旋轉速度[註二]。
- MAS Pneumatic Unit [**masdisp**]：顯示 MAS 控制視窗(使用 CP 或 HR-MAS 探頭時才會開啟視窗)。

5. Shim [**topshim**]：執行 Z 方向自動勻場功能。

- Display topshim report [**topshim report**]：顯示 topshim 的結果。
- Addition topshim options：其他 topshim 的功能。
- Shim manually using BSMS panel [**bsmsdisp**]：開啟 BSMS 控制視窗(參閱 **2-5. BSMS 控制視窗**)。
- Traditional gradient shimming [**gradshim**]：開啟磁場梯度勻場控制視窗。
- Read shim values [**rsh**]：讀取已儲存的勻場檔案。
- Write shim values [**wsh**]：將目前的勻場值存成檔案。
- Autoshim using tune file [**tune**]：使用勻場調整檔案進行自動勻場。
- Autoshim using tune file for current probe [**tune .sx**]：使用目前探頭之勻場調整檔案進行自動勻場。
- Edit autoshim definition (tune) file [**edtune**]：編輯勻場調整檔案。

6. Prosol [**getprosol**]：將"**edprosol**"內所輸入的參數值讀取至目前的光譜資料中。

7. Gain：自動調整接收器增益值 (receiver gain，RG 值)。

- Set receiver gain manually [**rg**]：手動輸入 RG 值。

8. Go [**zg**]：開始進行實驗。

- Transfer Fid To Disk [**tr**]：將蒐集至目前的 FID 予以存檔。
- Estimate Exp. Time [**expt**]：計算目前實驗所需時間。
- Real-Time Go Setup [**gs**]：開始進行實驗並可調整參數，調整參數後之結果會立即顯示。
- Optimize Acquisition Params [**popt**]：對某一實驗參數做漸進式的調整。
- Start Automation AU program [**xaua**]：執行在"AUNM"中設定之 AU 程式進行實驗。

9. Options：

- IconNMR Automation [**iconnmr**]：開啟 IconNMR 程式。
- TopGuide [**topguide**]：開啟 TopGuide 程式。
- One-Click Experiments [**bnmr**]：開啟 Button NMR 程式。
- Shape Tool [**stdisp**]：開啟 Shape Tool 程式。

※註一：調整 Match / Tune 的動作，若探頭本身沒有自動化功能，則需儀器負責人同意才能操作，以免傷害探頭。

※註二：一般設定樣品之轉速為 20Hz，通常不需更改此轉速，若不旋轉樣品，可將此數值設定為 0。

2-2. 收訊功能鍵

開始進行實驗 [**zg**]

暫停實驗的執行(會存入目前所獲得之 FID) [**halt**]

停止實驗的執行(不會存入目前所獲得之 FID) [**stop**]

開啟收訊視窗 [**acqu**]

計算實驗所需時間與檔案大小 [**expt**]

開啟氖鎖定視窗 [**lockdisp**]

開啟 BSMS 控制視窗 [**bsmsdisp**]

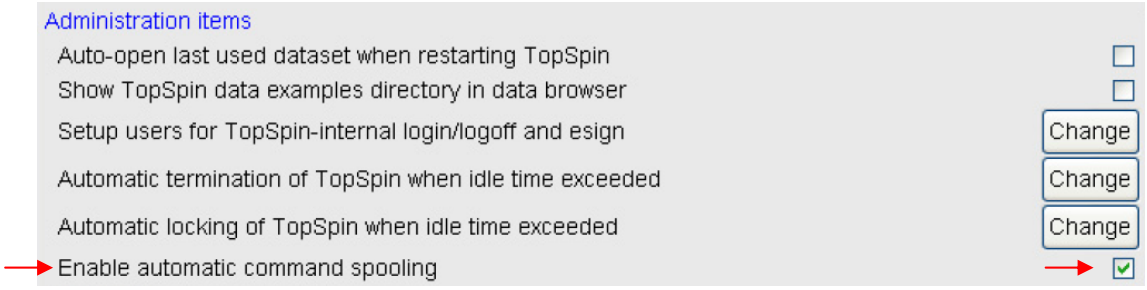
設定各頻道之中心(O1, O2, O3)

將目前所視之光譜，設定成新的光譜寬度(SW)與光譜中心(O1)

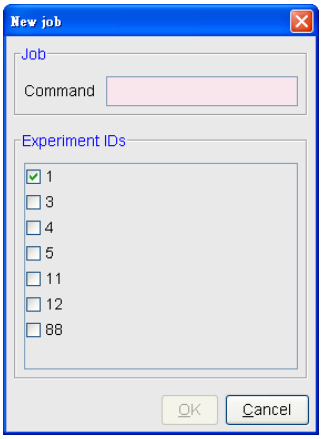
2-3. 指令之佇列、定時與排程執行

1. 佇列指令執行("qu", "qumulti")

鍵入"**qu+指令**"可將所執行之指令進行佇列，例如在 EXPNO = 2 的光譜區中鍵入"**qu zg**"且在 EXPNO = 8 的光譜區中亦鍵入"**qu zg**"，則 EXPNO = 2 的實驗將立刻執行，而 EXPNO = 8 的實驗於 EXPNO = 2 的實驗結束後自動執行。若將 User preferences 視窗(使用 Manage → Preferences 或鍵入"**set**"指令可開啟此視窗)中的"Enable automatic command spooling"功能開啟，則"**topshim**", "**zg**", "**go**", "**rga**"和"**atma**"五個指令不需另加"**qu**"指令在前方，即可自動將此指令進入佇列。



鍵入"**qumulti**"會出現如下之對話框：



於"Command"欄位中輸入任何 TopSpin 指令，並以點選方式在"Experiment IDs"欄位中選擇欲執行此指令的 EXPNO，則被選擇之 EXPNO 會依序完成所輸入之指令。

指令"**qumulti**"另有以下之輸入語法(*n* 與 *m* 分別代表不同的 EXPNO 數字)：

"**qumulti *n***"：選擇一個 EXPNO

"**qumulti ***"：選擇此 NAME 下的所有 EXPNO

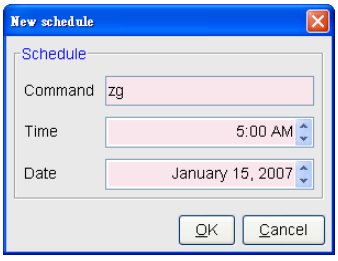
"**qumulti *n*-*m***"：選擇 EXPNO *n* 到 *m* (之間不需具有連續的 EXPNO)

"**qumulti *n m***"：選擇 EXPNO *n* 和 *m*

關於詳細的"**qu**"與"**qumulti**"指令說明，請鍵入"**help qu**"或"**help qumulti**"指令查詢。

2. 定時指令執行("at", "atmulti")

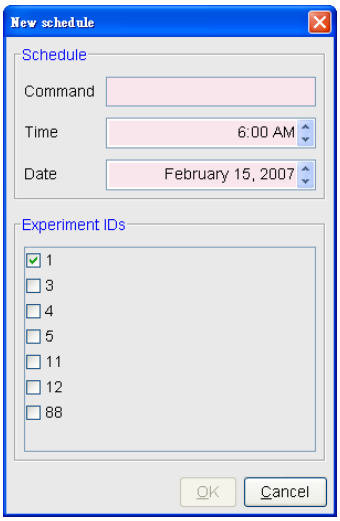
鍵入"**at+指令**"可將此指令定時執行，例如鍵入"**at zg**"會出現如下之對話框：



磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

調整時間後，"**zg**"指令將於所設定的時間開始執行。

鍵入"**atmulti**"會出現如下之對話框：



於"Command"欄位中輸入任何 TopSpin 指令，設定指令執行時間後，以點選方式在"Experiment IDs"欄位中選擇欲執行此指令的 EXPNO，則被選擇之 EXPNO 會於指定時間依序執行所輸入之指令。

指令"**atmulti**"另有以下之輸入語法(*n* 與 *m* 分別代表不同的 EXPNO 數字)：

"**atmulti *n***"：選擇一個 EXPNO

"**atmulti ***"：選擇此 NAME 下的所有 EXPNO

"**atmulti *n*-*m***"：選擇 EXPNO *n* 到 *m* (之間不需具有連續的 EXPNO)

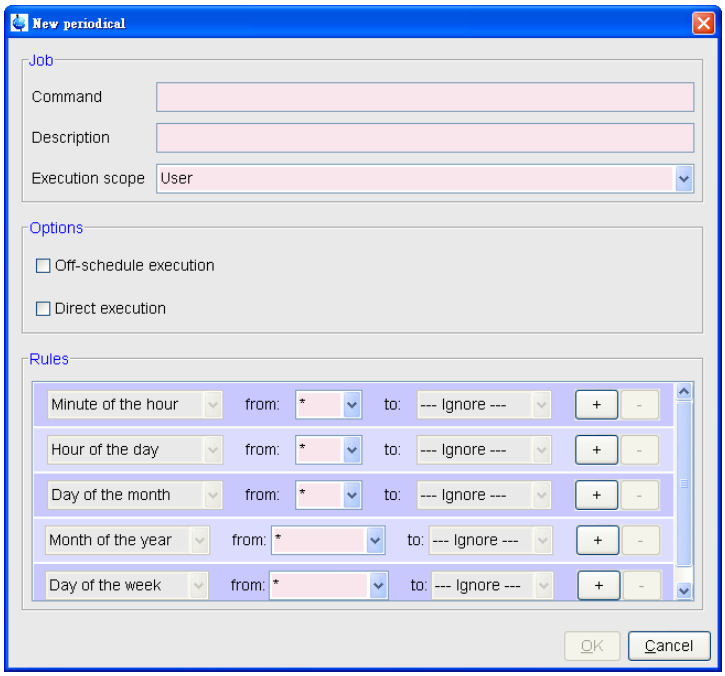
"**atmulti *n m***"：選擇 EXPNO *n* 和 *m*

關於詳細的"**at**"與"**atmulti**"指令說明，請鍵入"**help at**"或"**help atmulti**"指令查詢。

3. 排程指令執行("cron")

鍵入"**cron**"可設定週期性的指令定時執行，其週期性可為每一小時中的某一分鐘、每一天中的某一小時、每一個月中的某一天、每一

年中的某一月份和每一週中的某一天。當鍵入"**cron**"指令時會出現如下之對話框：



- **Command**：欄位中可輸入任何 TopSpin 指令。
- **Description**：將此週期性執行事項加入說明或註解。
- **Execution scope**：有"User"與"TopSpin"兩者可供選擇

  選擇"User"：到達執行時間時，必需為設定此功能的使用者在登入 TopSpin 的情況下，週期性事項才會執行。

  選擇"TopSpin"：到達執行時間時，只要有使用者在登入 TopSpin 的情況下(TopSpin 開啟之狀態)，週期性事項便可執行，但設定時需要 NMR super user 密碼，一般可將"Command"設定為"**nmr_save**"，定時執行 TopSpin 的備份。
- **Off-schedule execution**：

  不勾選：到達執行時間時，若 TopSpin 未在開啟之狀態下，週期性事項則不會執行。

  勾選：到達執行時間時，若 TopSpin 未在開啟之狀態下，週期性事

項會等待至 TopSpin 下次開啟時立即執行最後一個週期性事項。

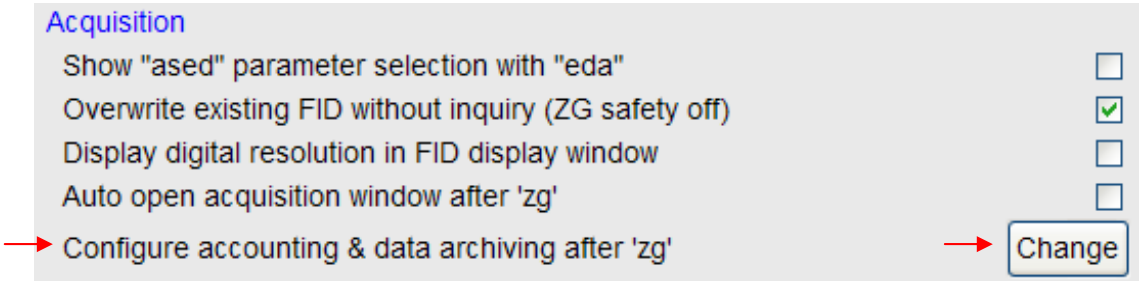
- **Direct execution**：

不勾選：到達執行時間時，週期性事項會將指令加入佇列，若週期性指令為"**zg**"，此項等同於到達時間時執行"**qu zg**"指令。

勾選：到達執行時間時，週期性事項不會將指令加入佇列而直接執行若週期性指令為"**zg**"，此項等同於到達時間時執行"**zg**"指令。

- **Rules**：選擇週期性類別，再指定起始與結束時間(欄位 from 和 to)，結束時間可不設定(使用"Ignore")，並使用 + 與 - 按鍵增加或減少此週期性內之時間設定。

若使用"**cron**"執行週期性實驗(例如動力學(kinetic)的反應追蹤)，請設定 User preferences 視窗(使用 Manage → Preferences 或鍵入"**set**"指令可開啟此視窗)中的"Configure accounting & data archiving after 'zg'"選項(按下 Change 按鍵)：



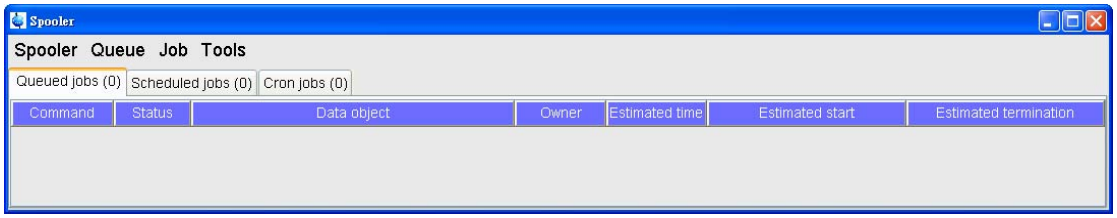
將上視窗"Write accounting info after 'zg'"選為"yes"時，TopSpin 會將使用者使用儀器的收訊時間，以每日一檔案的方式，記錄於 "<TopSpin home directory>/prog/curdir/acqhistory"的資料夾中，其檔案名稱的格式為"acqYYYY-MM-DD.xml"("YYYY"為年份，"MM"為月份，"DD"為日期)，並可使用"**account**"指令開啟檔案查閱。關於詳細的"**cron**"指令說明，請鍵入"**help cron**"指令查詢。

4. Spooler 視窗("spooler", "edqu", "edat", "edcron")

執行"**qu**"、"**at**"或"**cron**"類的指令時，狀態列中的"Spooler"會顯示各類指令執行或佇列之狀況(狀態列的"Spooler"開啟方法，請參考 **1-5. 狀態列**之說明)：

如上圖所示，表示有三個佇列執行指令("**qu**" type)、兩個定時執行指令("**at**" type)和一個排程執行指令("**cron**" type)，當指令正在執行時，其中字體將呈現綠色閃爍形式。

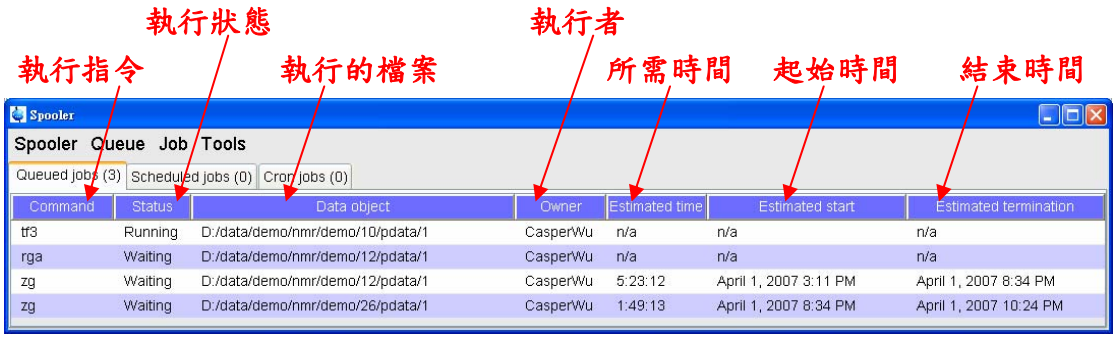
使用滑鼠左鍵點選狀態列中的"Spooler"字體或鍵入"**spooler**"指令，可開啟 Spooler 視窗：



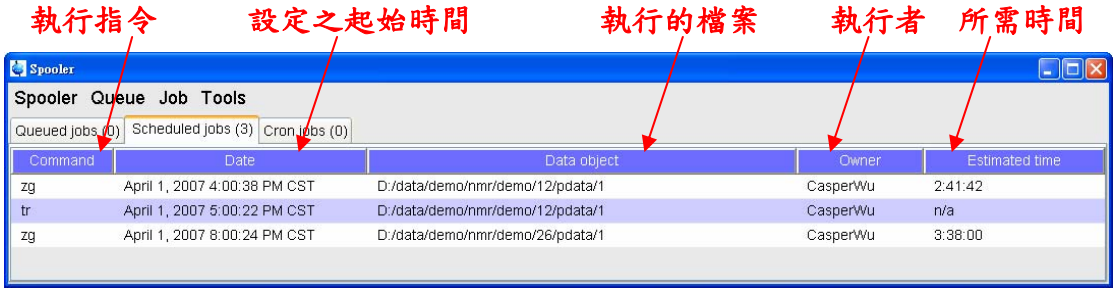
選擇此視窗中主功能表"Spooler" → "Suspend"可將所有指令暫停，且狀態列中的 Spooler 視窗會呈現反白，若再選取"Suspend"，則程序會再啟動。Spooler 視窗有三個主要頁面，分別顯示佇列、定時與排程

指令執行之詳細狀況：

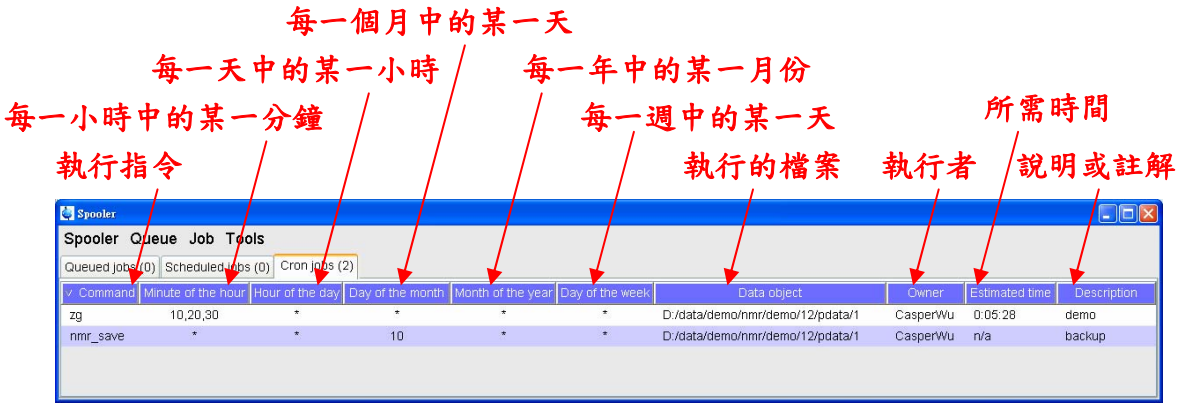
- **Queued jobs 頁面**(佇列指令頁面，可使用"**edqu**"指令直接進入)：



- **Scheduled jobs 頁面**(定時指令頁面，可使用"**edat**"指令直接進入)：

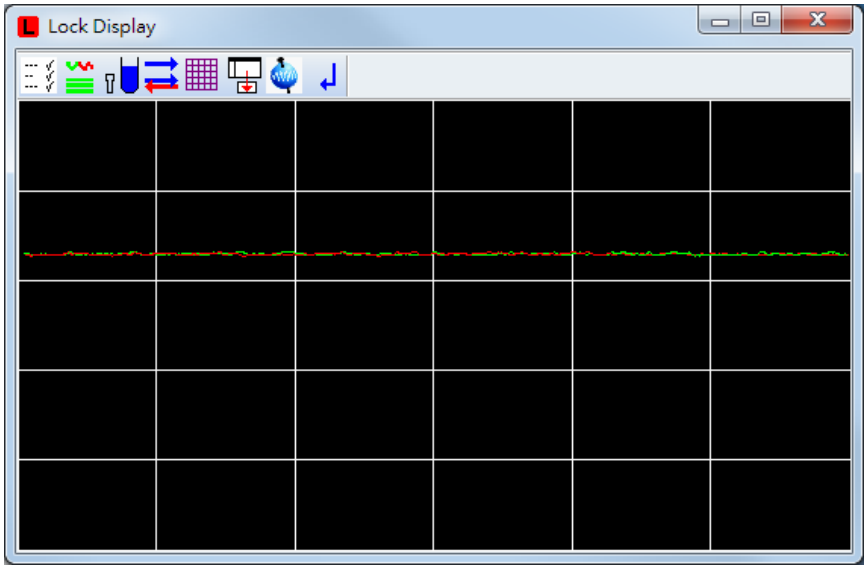


- **Cron jobs 頁面**(排程指令頁面，可使用"**edcron**"指令直接進入)：



2-4. 氘鎖定視窗

按下 按鍵或鍵入"**lockdisp**"指令即可開啟氘鎖定視窗。



開啟 TopSpin 功能設定視窗 [**set**]

切換狀態列中氘鎖定視窗之顯示模式(線條模式或數字模式)

進行磁場鎖定[**lock**]

切換氘鎖定視窗中單線與雙線之顯示模式

切換氘鎖定視窗中格線之顯示模式

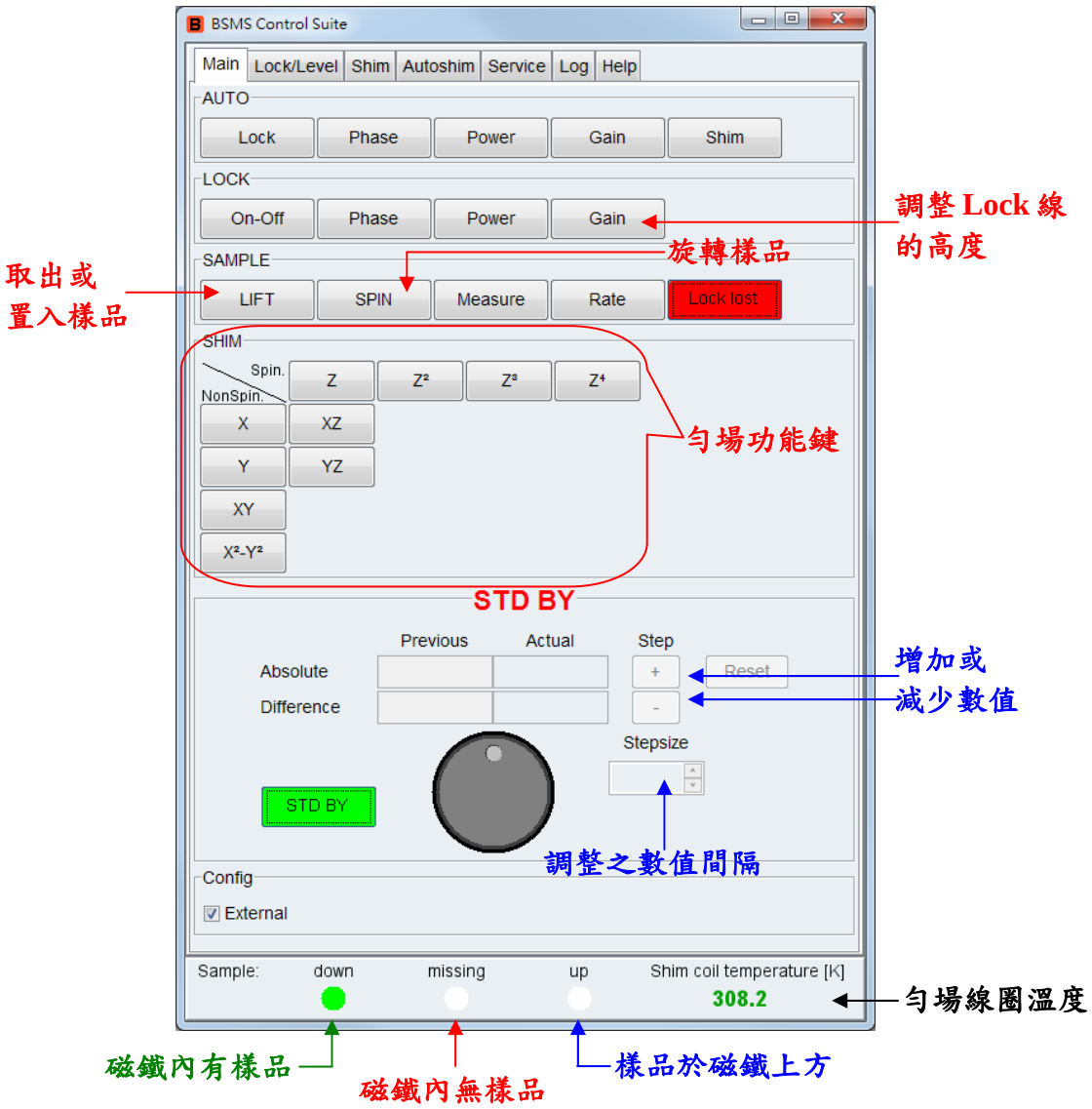
切換氘鎖定視窗顯示位置(獨立顯示或置入 TopSpin 主視窗)

切換至 TopSpin 主視窗

關閉氘鎖定視窗

2-5. BSMS 控制視窗

按下 或鍵入"**bsmsdisp**"指令即可開啟 BSMS 控制視窗，再利用滑鼠滾輪增減各項數值。



- 當按下按鍵，功能運作時，按鍵會顯示**紅色** On-Off 。
- 當功能運作完成時，按鍵會顯示**綠色** On-Off 。
- 當勻場功能鍵執行時，按鍵會顯示**黑色** Z 。
- 當磁場鎖定完成時 Lock Lost 會顯示為 Always Locked

第三章 光譜處理 (Data Processing)

以下介紹在 TopSpin 中，光譜處理的操作介面。關於詳細的光譜處理之相關設定參數，請參閱主功能表 → → "Manuals" → "Proc. Commands & Parameters"。

3-1. 手動處理光譜

光譜處理的參數記載在 Processing Parameter 表格中[註三]。將光譜轉換的指令輸入於指令列中，即會套用參數進行處理，指令列舉如下(1D 光譜使用指令)：

- **ft**: Fourier transform (傅立葉轉換)
- **fp**: Fourier transform + phase correction (傅立葉轉換+相位修正)
- **ef**: Exponential multiplication + ft (套用EM視窗函數+ ft)
- **efp**: Exponential multiplication + fp (套用EM視窗函數+ fp)
- **gf**: Gaussian multiplication + ft (套用GM視窗函數+ ft)
- **gfp**: Gaussian multiplication + fp (套用GM視窗函數+ fp)
- **apk**: automatic phase correction (自動相位修正)
- **abs**: automatic baseline correction (自動基線校正)

※註三：此頁面的參數皆已設定，一般不需要更動，可參考"Proc. Commands & Parameters"中之說明進行各項參數之修改(由主功能表 → → "Manuals"中選取)。

3-2. 光譜處理流程按鍵

點選主功能表中的 Process 頁面，下方會顯示光譜處理流程按

鍵，如下圖：

按鍵會依據不同維度的光譜而顯示不同的功能，以下說明 1D 光譜所顯示的按鍵功能。

1. **Proc. Spectrum** [**proc1d y**]：使用"**proc1d**"指令中所設定之光譜處理參數自動處理光譜。
   - Configure Standard Processing [**proc1d**]：設定自動光譜處理之參數。
   - Window Multiplication [**wm**]：開啟即時視窗函數調整功能[註四](參閱 **5-1. 即時視窗函數調整功能**)。
   - Fourier Transform [**ft**]：進行傅立葉轉換。
   - Start Automation AU Program [**xaup**]：執行在"AUNMP"中設定之 AU 程式處理光譜。
2. **Adjust Phase** [**.ph**]：進入相位修正調整模式(參閱 **5-2. 1. 相位修正模式**)。
   - Phase Spectrum Using PHC0/PHC1 [**pk**]：使用 PHC0 與 PHC1 所設定之參數進行相位修正。
   - Automatic Phasing Options：自動相位修正選項。
   - Calc. Magnitude Spectrum [**mc**]：將訊號平方再開更號。
   - Calc. Power Spectrum [**ps**]：將訊號平方。
3. **Calib. Axis** [**.cal**]：進入化學位移校正模式(參閱 **5-2. 2. 化學位移校正**)。
   - Set TMS To 0 ppm [**sref**]：自動校正 TMS 譜峰定為 0 ppm。
4. **Pick Peaks** [**.pp**]：進入譜峰標定模式(參閱 **5-2. 4. 譜峰標定**)。

- Auto-Pick All [**ppf warm**]：對全光譜範圍進行譜峰標定。
- Show/Modify Picking Parameters：顯示/修改譜峰標定相關參數。
- Auto-Pick Displayed Region [**pps**]：對目前顯示之光譜範圍進行譜峰標定。
- Auto-Pick Regions Defined in File *peakrng* [**ppl**]：對"peakrng"檔案設定之光譜範圍進行譜峰標定。
- Calculate Peak Width [**peakw**]：計算目前顯示光譜範圍內最強譜峰之半高寬。

5. Integrate [**.int**]：進入積分模式(參閱 5-2. 5. 積分模式)。

- Auto-Integrate [**int auto**]：自動積分譜峰。
- Show Auto-Integration Parameters：顯示/修改譜峰積分相關參數。
- Integrate Regions File intrng：將積分與譜峰標定以文字檔顯示。

6. Advanced：

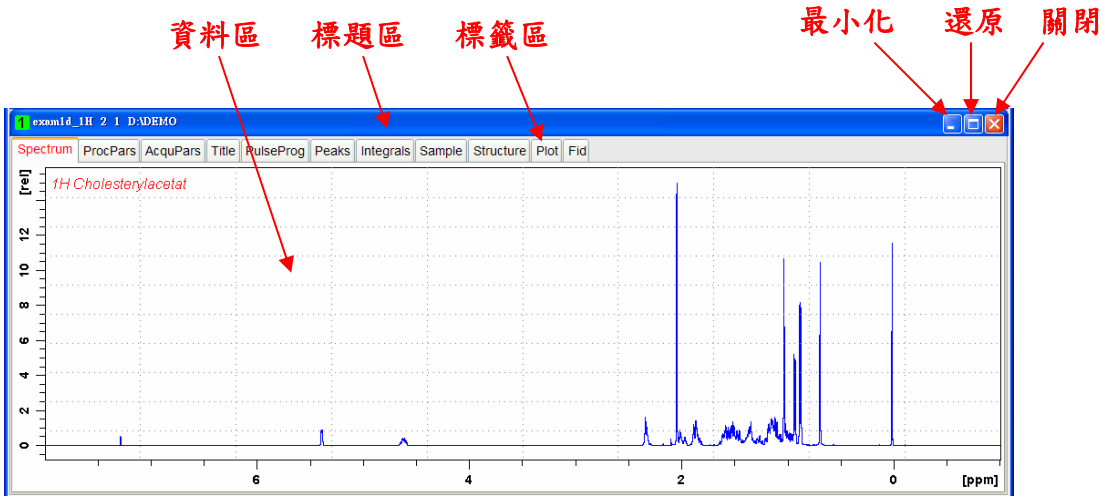
- Process Dataset List [**serial**]：顯示多重光譜處理功能鍵。
- Integrate Spectrum List [**intser**]：顯示多重光譜積分功能鍵。
- ROI View of Spectrum List [**vregs**]：開啟 ROI View 功能視窗。
- Add/Sub./Mult. Spectra [**adsu**]：顯示光譜相加/相減/相乘功能鍵。
- Correct Baseline：基線校正功能選項。
- Special Transforms：特殊轉換功能選項。
- Miscellaneous Operations：其他光譜處理選項。

※註四：視窗函數是一種數學函數，與原本收集到的 FID 做相乘處理，藉以獲得較佳之光譜。對於 1D 光譜常用的視窗函數有 EM、GM，對於 2D、3D 則常用 SINE、QSINE。

第四章 光譜介面 (Spectrum Display)

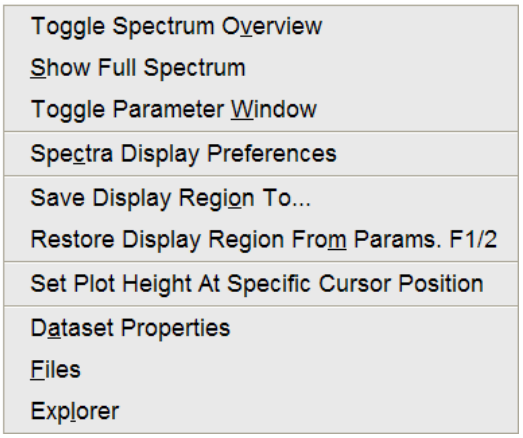
4-1. 1D 光譜介面

1D 光譜，可以分成以下區塊：



1. 資料區：顯示光譜

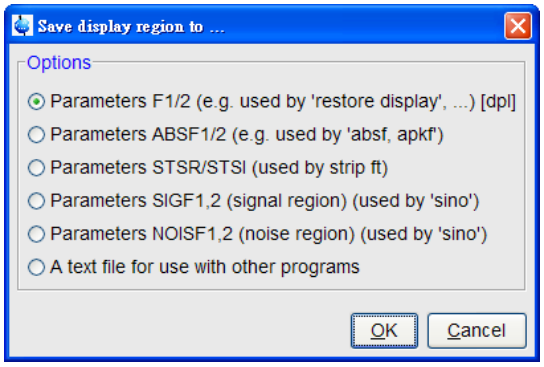
在光譜顯示區上按滑鼠右鍵，會出現如下選項：



- **Toggle Spectrum Overview**：顯示圖譜總覽(於光譜上方出現一子畫面)，等同於功能鍵。
- **Show Full Spectrum**：顯示全光譜，等同於功能鍵。
- **Toggle Parameter Window**：自動分割視窗顯示設定光譜參數。

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

- **Spectra Display Preferences**：顯示光譜區形式的設定視窗。
- **Save Display Region To...**：會顯示如下圖的選單，可將目前顯示的範圍依不同功能的選取而存入不同的參數中：



- **Parameters F1/2 [dpl]**

  將目前顯示的範圍存入參數"F1P"和"F2P"，以便爾後回到相同範圍的視窗。利用資料區中壓滑鼠右鍵選取"Restore Display Region from Params F1/2"，光譜的範圍即可回到存入的範圍。

- **Parameters ABSF1/2**

  將目前顯示的範圍存入參數"ABSF1"和"ABSF2"，此為設定限定範圍的自動基線調整與自動相位調整指令所使用的範圍(指令分別為"**absf**"和"**apkf**")。

- **Parameters STSR/STSI**

  將目前顯示的範圍存入參數"STSR"和"STSI"，此參數的設定，可進行局部的光譜處理。

- **Parameters NOISF1/2**

  將目前顯示的範圍存入參數"NOISF1"和"NOISF2"，用於"**sino**"指令計算訊雜比。

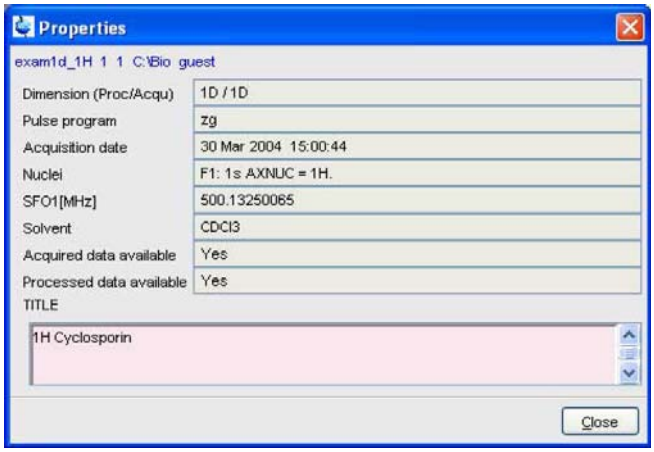
- **Parameters SIGF1/2**

  將目前顯示的範圍存入參數"SIGF1"和"SIGF2"，用於"**sino**"指令計算訊雜比。

- **A text file for use with other programs**

  將目前顯示的範圍存成文字檔，其中包含光譜邊界、所含點數與各點強度等資訊。

- **Restore Display Region From Params. F1/2**：將光譜顯示為參數 F1P 與 F2P 所設定之範圍。
- **Set Plot Height At Specific Cursor Position**：可設定游標位置譜峰的相對高度。
- **Dataset Properties**：顯示目前的檔案屬性，顯示之檔案屬性如下圖所示：

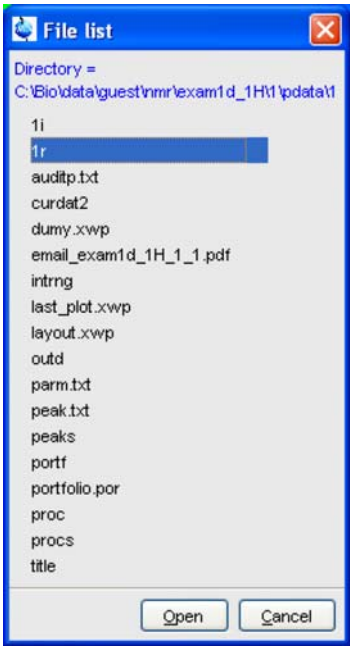


- **Files**：顯示目前光譜資料的相關檔案，顯示之光譜資料的相關檔案如下圖所示：

未執行傅立葉轉換前：

顯示光譜收集的資料檔案

(EXPNO 中的檔案)



執行傅立葉轉換後：

顯示光譜處理的資料檔案

(PROCNO 中的檔案)

- **Explorer**：開啟 Windows 的檔案資料夾，並顯示在目前光譜的 PROCNO 之檔案位置，等同於"**expl**"指令。

2. 標題區：顯示實驗名稱、路徑等。

3. 標籤區：切換各種功能頁面，其中標籤區分為：

3.1 Spectrum：光譜顯示區，其調整方式請參閱 **1-3. 工具列**介紹。

3.2 ProcPars：設定光譜處理參數。關於詳細參數說明請參閱"Proc. Commands & Parameters" (由主功能表 → → "Manuals"中選取)。

工具列按鍵：

回復上一次的更動

查看上次光譜處理的參數狀態 [**dpp**]

改變光譜處理時之實驗維度(1D ~ 8D)

使用 MAXENT (maximum entropy)處理光譜(需另外 license)

顯示數位定量(Digital Eretic)功能之參數，請參考**第九章**

切換隱藏或展開顯示所有的參數

輸入關鍵字搜尋參數

3.3 AcquPars：設定實驗參數。關於詳細參數說明請參閱"Acqu. Commands & Parameters" (由主功能表 → → "Manuals"中選取)。

工具列按鍵：

回復上一次的更動

進入"**ased**"模式，調整實驗參數

查看完成此實驗的參數狀態 [**dpa**]

在此模式中可按下按鍵，可讀取樣品在實驗時所使用的勻場數值 [**rsh acqu**]

執行"**getprosol**"指令，取得脈衝校正值

進入"**edasp**"模式，選擇偵測核種

改變實驗維度，可在 1D ~ 8D 之間做切換

切換隱藏或展開顯示所有的參數

設定多重收訊(multi-receiver)實驗之檔案

輸入關鍵字搜尋參數

3.4 Title：實驗標題命名

工具列按鍵：

將寫入的標題儲存

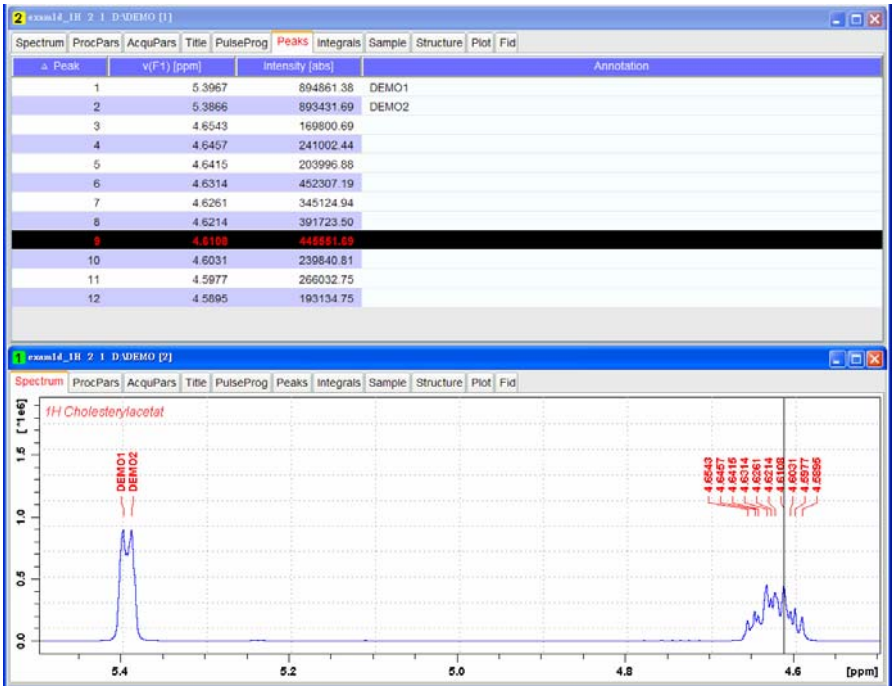
將寫入的標題另存新檔

取消正在修正的編寫區，回復到儲存值

利用使用者設定之文字編輯程式開啟標題檔案

3.5 PulseProg：顯示脈衝程序內文及顯示實驗設定的參數與提示。

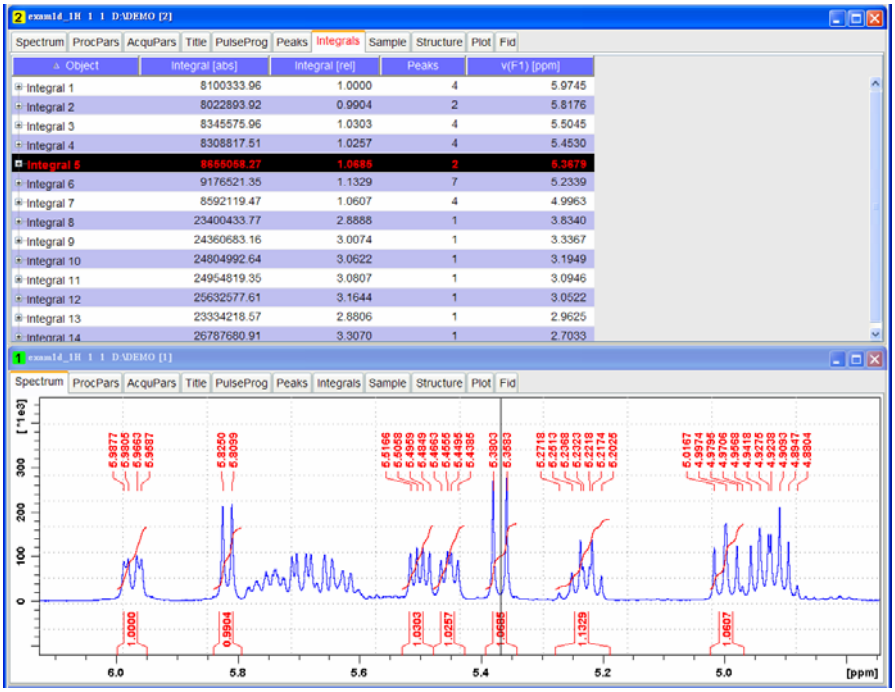
3.6 Peaks：譜峰列表。若有執行譜峰標定的動作，則從此頁面可看到譜峰標定資訊，於任一譜峰上按下滑鼠右鍵可出現功能選單，而在"Annotation"可輸入譜峰的註解。可利用雙視窗顯示之方式，同時顯示譜峰資訊與其光譜所在位置：



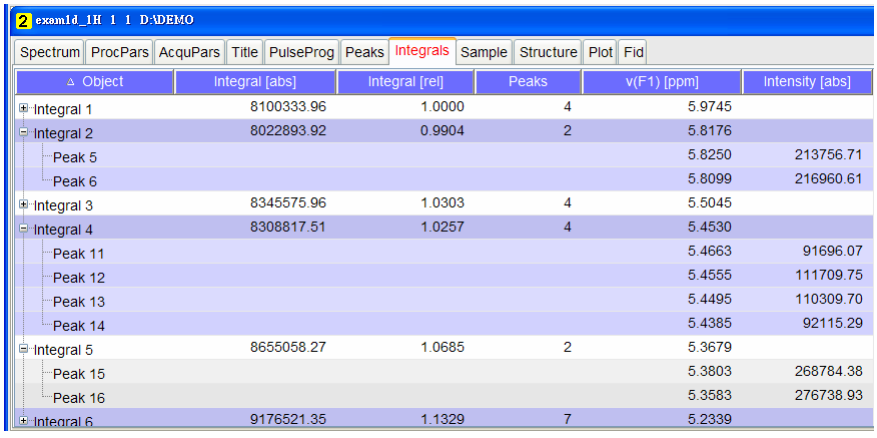
3.7 Integrals：積分列表。若有執行積分的動作，則從此頁面可看到積分列表，於任一積分數值中按下滑鼠右鍵，可出現功能選單。可

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

利用雙視窗顯示之方式，同時顯示積分資訊與其光譜所在位置：



亦可將積分數值展開，顯示此範圍內所標定之譜峰位置：



3.8 Sample：樣品註解，可輸入樣品的相關資訊，方便以後查詢。

工具列按鍵：

將寫入的註解儲存

將寫入的註解另存新檔

取消更改後之欄位，回復到預設欄位

增加註解之欄位

以下按鍵需先於欄位前的文字上雙擊滑鼠左鍵，使其變為紅色文字後，其按鍵才可使用

 刪除所選取之欄位

將此欄位向上移動

將此欄位向下移動

3.9 Structure：繪製分子結構或載入結構資料檔(支援之格式為：*.mol, *.xyz, *.pdb, *.cml, *.out)，可於TopSpin中顯示分子結構。詳細的說明與步驟，請參考"Structure Analysis Tools" (由主功能表 → → "Manuals"中選取)

3.10 Plot：光譜列印，進入此頁面，再按下 按鍵列印。

工具列按鍵：

顯示列印檔案資訊，包括圖譜列印範本檔的位置(Loaded from)、使用的印表機(Target printer)、紙張大小(Paper size)和將列印之光譜檔案(Data Set List)等

選擇圖譜列印範本檔

使用 TOPSPIN Plot Editor 程式中"Automation Reset Actions"功能設定之範圍與高度作為列印標準。(於 TOPSPIN Plot Editor 程式的光譜中壓滑鼠右鍵，並選擇"Automation..."可進行設定)

將在光譜重疊模式(按鍵)所重疊之光譜進行列印

開啟並進入 TOPSPIN Plot Editor 程式

+/1D_H.xwp 目前所使用的圖譜列印範本檔

3.11 Fid：顯示光譜原始 FID 圖形。

3.12 Acqu：顯示光譜收訊視窗。

工具列按鍵：

以下按鍵會於實驗開始前與實驗結束後出現

開始進行實驗 [**zg**]

調整共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching) [**wobb**]

以較粗的線顯示 wobb 曲線 [**wobbt**]

開始進行實驗並可調整參數，調整參數後之結果會立即顯示 [**gs**]

鎖定目前 FID 的顯示大小，則在開啟其他光譜時，會限定顯示鎖定時的大小，按鈕呈綠色即鎖定，再按一次即解除

以下按鍵會於實驗進行中與實驗結束後出現

顯示實部之 FID 圖形

上下顯示實部與虛部之 FID 圖形

左右顯示實部與虛部之 FID 圖形

重疊顯示實部與虛部之 FID 圖形

以下按鍵僅會於實驗進行中出現

即時將 FID 轉換為光譜

實驗的執行(會存入目前所獲得之 FID) [**halt**]

將實驗暫停於指定的掃瞄次數 [**halt+數字**]

停止實驗的執行(不會存入目前所獲得之 FID) [**stop**]

將目前掃瞄獲得的 FID 存入硬碟，且實驗並不會停止 [**tr**]

將實驗於指定的掃瞄次數獲得的 FID 存入硬碟 [**tr+數字**]

4-2. 2D 光譜介面

2D 光譜介面的操作模式類似 1D 操作，並增加以下功能鍵：

於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，以改變等高線倍率值

設定等高線參數，當光譜以等高線圈表示時，由此功能設定圈數及每圈的倍率或倍數值 [**edlev**, **.lv**]

切換 正訊號/負訊號/同時顯示 之功能鍵 [**.lt**]

儲存目前光譜等高線圈參數值 [**.ls**]

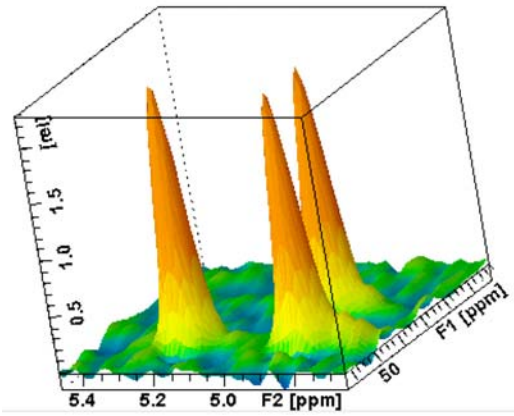
切換顯示 2D 圖譜旁兩個維度的 1D 投影圖 [**.pr**]

將光譜以等高線圈模式顯示 [**.co**]

將光譜以漸層色表示 [**.im**]

點壓滑鼠左鍵拖曳，可將 2D 光譜上下左右移動

將光譜以立體圖畫出，如下圖[**.st**]：



磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

於立體圖顯示之模式中，以下功能鍵才可作用：

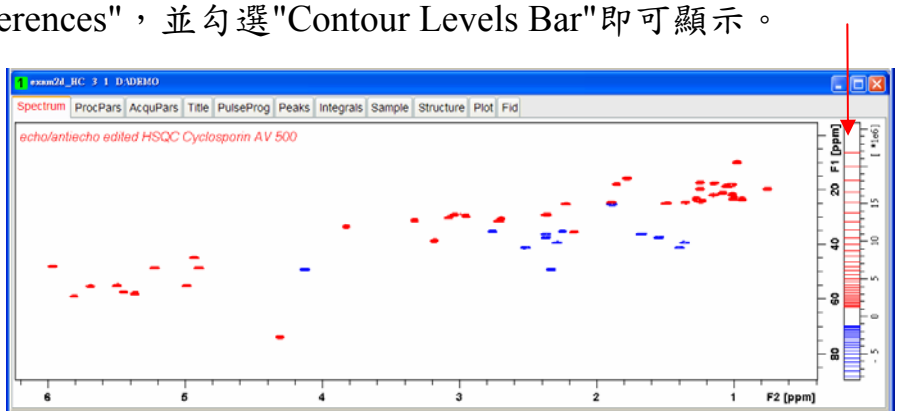
於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，進行平行螢幕方向旋轉

於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，進行垂直螢幕方向旋轉

回復至內定之立體圖觀察視角

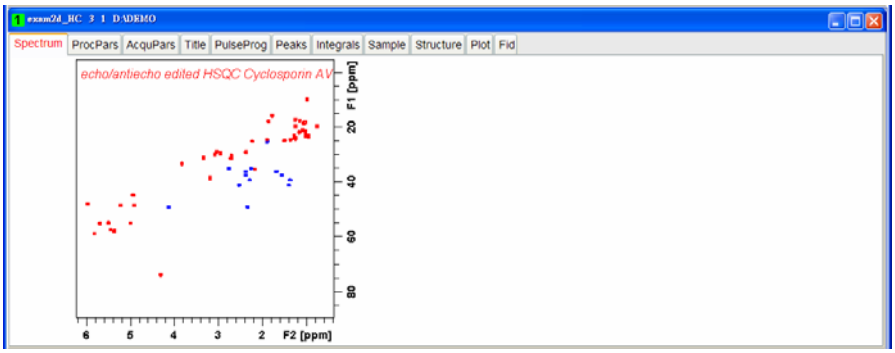
◎如何顯示 2D 光譜之等高線圈高度標示?

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"Spectra Display Preferences"，並勾選"Contour Levels Bar"即可顯示。



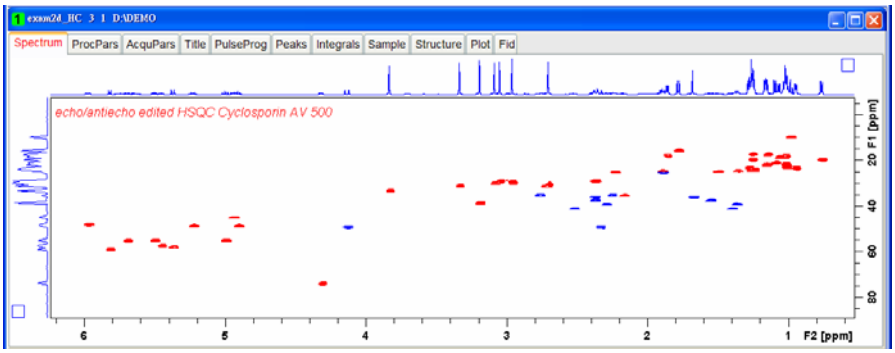
◎如何將 2D 光譜顯示成正方形?

於資料區中壓滑鼠右鍵出現功能選單，選取其中之"Square Layout On/Off"即可將光譜顯示成正方形。



◎如何在 2D 光譜旁顯示 1D 光譜?

於工具按鍵中按下 即可顯示 1D 光譜。



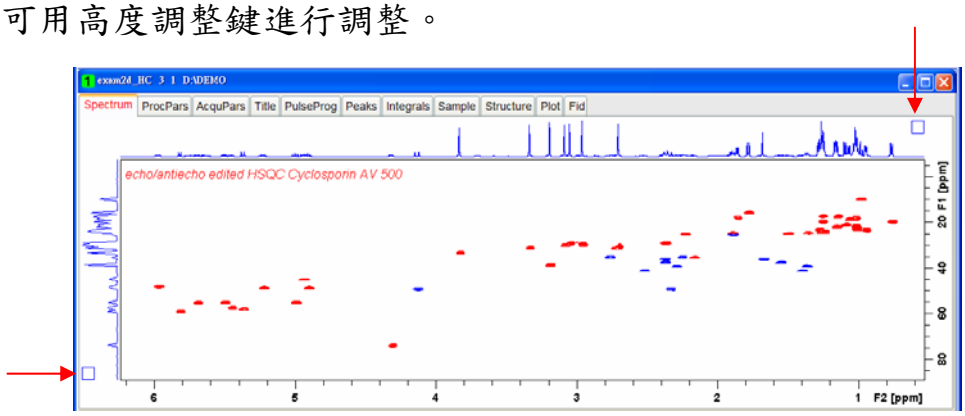
◎如何選擇 2D 光譜旁之 1D 光譜檔案?

於 1D 光譜上使用滑鼠右鍵，可出現一選單：

- **External Projection**：需輸入 1D 光譜檔案位置，則會出現指定之 1D 光譜。
- **Internal Projection**：顯示沿此軸之 1D 投影圖
- **Baseline at Center**：控制 1D 光譜的基線位置於視窗中間。
- **Baseline at Bottom**：控制 1D 光譜的基線位置於視窗下方。

◎如何調整 2D 光譜旁之 1D 光譜高度?

點選於 1D 光譜旁之正方形方框，使其變為實心之正方形，此時即可用高度調整鍵進行調整。



4-3. 3D 光譜介面

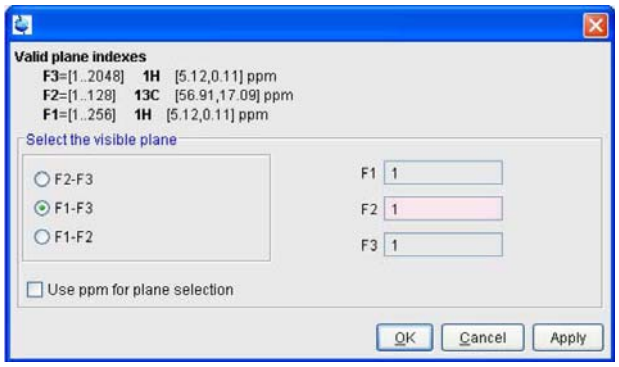
3D 光譜介面的操作模式類似 1D 與 2D 操作，並增加以下功能鍵：

切換到下一個平面(平面數等於光譜處理參數中各軸 SI 值)

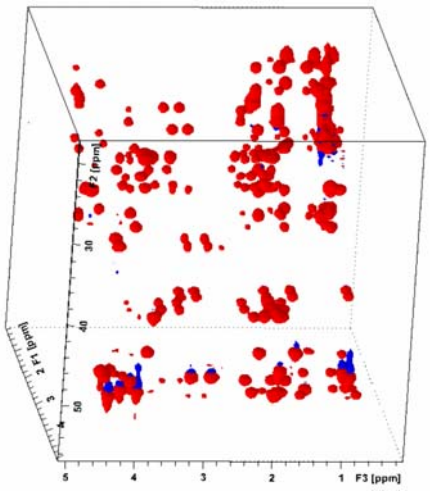
切換到上一個平面(平面數等於光譜處理參數中各軸 SI 值)

於此鍵上壓住滑鼠左鍵，上下拖曳以瀏覽各平面

出現視窗，輸入欲觀察的平面數值，可用 SI 參數或 ppm 作為選取的單位，如下圖所示：



將 3D 光譜以立方體顯示，如下圖：



於立方體顯示之模式中，將會增加以下功能鍵：

顯示 F1、F2 平面

顯示 F2、F3 平面

顯示 F3、F1 平面

於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，將 3D 方塊沿著 X 軸旋轉

於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，將 3D 方塊沿著 Y 軸旋轉

於此鍵上壓住滑鼠左鍵拖曳，將 3D 方塊沿著 Z 軸旋轉

回復至內定之立方體觀察視角

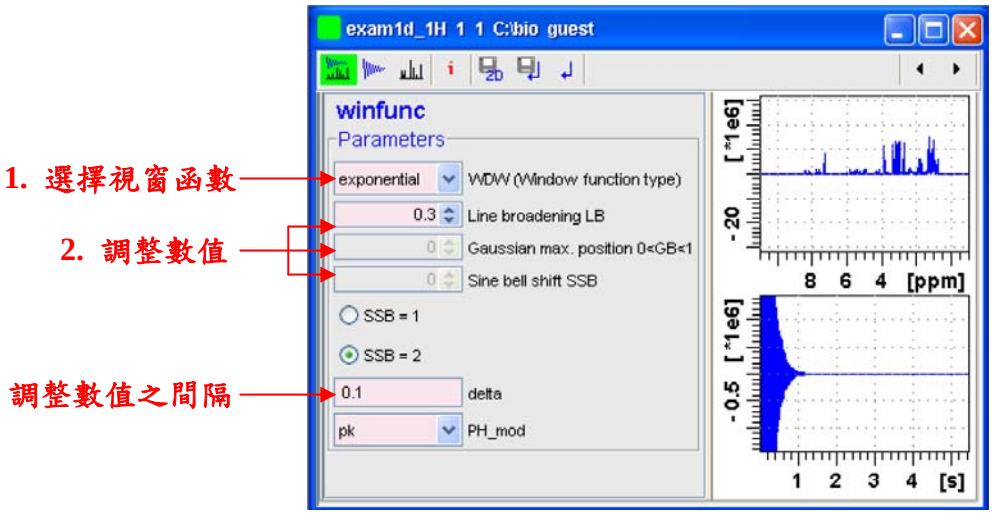
第五章 1D 光譜處理操作

(1D Interactive Manipulation)

5-1. 即時視窗函數調整功能

可調整視窗函數並即時顯示調整後的光譜與 FID 變化。

由主功能表→ Process → Proc. Spectrum → "Window Multiplication" →點選"Manual window adjustment" → OK 或鍵入 "**wm**"指令即可開啟如下視窗：



工具列按鍵：

同時顯示光譜與 FID

僅顯示 FID

僅顯示光譜

切換 開啟/關閉 游標資訊

將視窗函數調整結果存入 2D 光譜中

將視窗函數調整結果存入光譜中[註五]並離開此視窗

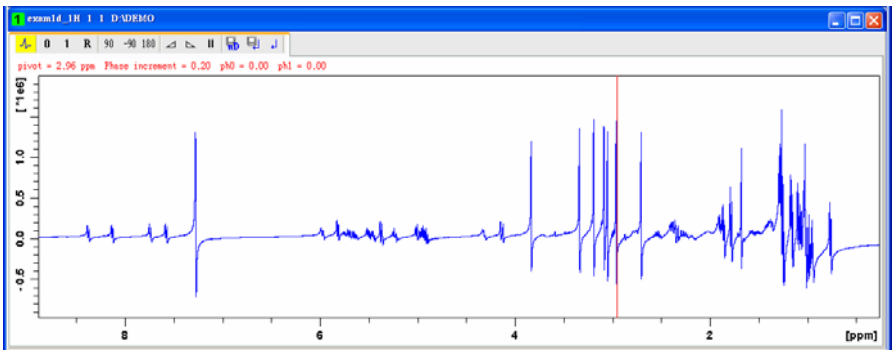
不儲存離開

※註五：即時視窗函數調整功能僅限於 1D 光譜，因此 2D 光譜必須執行"**rser**"指令，將其中的 1D 光譜取出才可進入此功能。

5-2. 光譜處理

光譜的處理由 Process 頁面所顯示之功能鍵進行控制。

1. 相位修正模式：點選 Adjust Phase 按鍵或鍵入"**.ph**"指令



進入相位修正模式後視窗如上，其中 表示在相位修正模式中。

工具列按鍵：

0	以滑鼠左鍵拖曳，調整 0 次方相位修正(調整紅色線所在譜峰)
1	以滑鼠左鍵拖曳，調整 1 次方相位修正(調整紅色線以外譜峰)
R	回復到未調整前的數值
90	將相位正向轉 90 度
-90	將相位反向轉 90 度
180	將相位旋轉 180 度
	增加滑鼠敏感度，使拖曳速度增加
	減少滑鼠敏感度，使拖曳速度減少
II	重設滑鼠靈敏度
nD	將相位修正調整結果存入 nD 光譜中(n ≥ 2)

磊威科技股份有限公司 Rezwave Technology Inc.

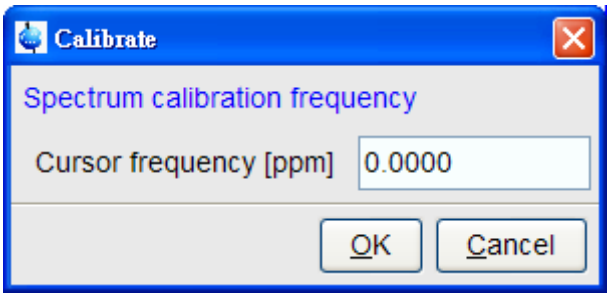
將相位修正調整結果存入光譜中並離開此模式

不儲存離開

2. 化學位移校正：點選

按鍵或鍵入"**.cal**"指令。

於光譜區上，將紅線移到參考訊號上，點擊左鍵即會出現一對話框，填入欲定義的化學位移，如圖：



按下

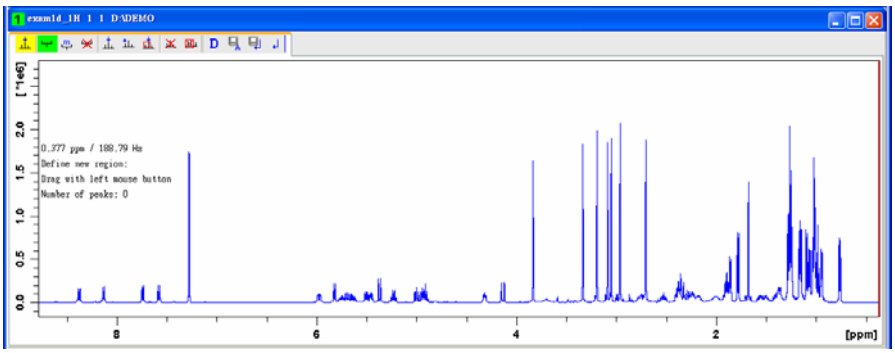
即完成化學位移校正。

3. 基線調整

於一般 1D 圖譜之基線校正，僅需鍵入"**abs**"(auto baseline correction)指令，即可獲得良好的校正結果。

4. 譜峰標定：點選

按鍵或鍵入"**.pp**"指令。



當功能鍵呈現黃色底色，即表示此功能運作中，如 代表譜峰標定功能運作中，再點選一次功能鍵，可取消此功能之運作。

工具列按鍵：

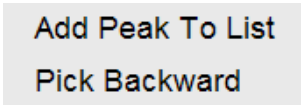
點選此模式，可在光譜區上拖曳出方框，方框內若含有譜峰峰頂，則此譜峰將被標記。可同時畫出許多方框，譜峰被標記後方框即會消失

調整方框的大小

刪除所有方框

手動標定譜峰。點選此模式，則滑鼠移到欲標記的位置，按滑鼠左鍵標記

半自動標定譜峰。此模式會從按下左鍵的位置向右尋找譜峰峰頂，並以紅線標示峰頂位置，再按滑鼠右鍵後，會出現如下之功能表：



- **Add Peak To List**

  標定紅線所在之譜峰。

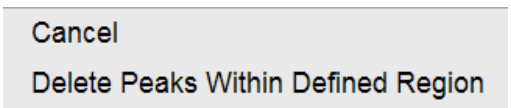
- **Pick Backward**

  將紅線移回按下左鍵的位置。

標定定義方框內之譜峰

刪除所有譜峰標定值

點選此模式，可在光譜區上拖曳出方框，拖出方框後，會出現如下之功能表：



- **Cancal**

  取消此動作。

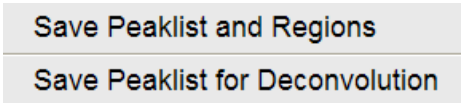
- **Delete Peaks Within Defined Region**

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

刪除方框內之譜峰標定值。

將標定出的譜峰標定值存入"peaklist"的檔案中，並進行重疊峰拆解(重疊峰拆解的詳細方法請參考 8-2. 重疊峰拆解)

按下此按鍵後，會出現如下之功能表：



- **Save Peaklist and Regions**

  將譜峰標定值存入光譜中。

- **Save Peaklist for Deconvolution**

  將標定出的譜峰值存入"peaklist"的檔案中，以供重疊峰拆解使用[**convertpeaklist peaklist**]。

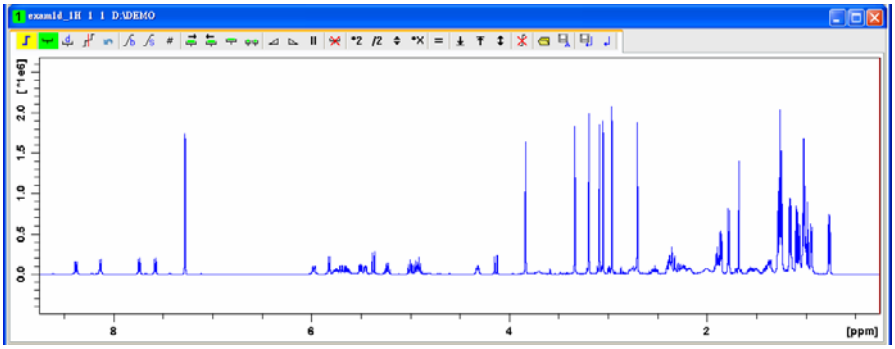
將譜峰標定值存入光譜中並離開此模式

不儲存離開

於調整方框大小的功能運作中時(功能鍵顯示為)，於方框內按下滑鼠右鍵，會出現如下之功能表：

- **Pick Peaks On Ranges**：標定定義方框內之譜峰。
- **Show Peak List**：顯示已定義之譜峰數值列表。
- **Delete All Regions**：刪除所有方框。
- **Delete Region Under Cursor**：僅刪除游標所在之方框。

5. 積分模式：點選 Integrate 按鍵或鍵入"**.int**"指令。



當功能鍵呈現黃色底色，即表示此功能運作中，如 代表積分功能運作中，再點選一次功能鍵，可取消此功能之運作。

工具列按鍵：

- 以滑鼠拖曳選取積分範圍
- 出現對話框，輸入積分的範圍值
- 分割積分區域
- 回復上一次的動作
- 微調積分曲線之斜度(bias)
- 微調積分曲線之斜率(slope)
- # 定義積分範圍最小寬度，若設為 1ppm 時，則滑鼠拖曳範圍須大於 1ppm 積分範圍才成立，一般設為零，即不限定
- 向右選取積分區段
- 向左選取積分區段
- 選取所有的積分區段
- 多重選取積分區段，在此模式運作時，於光譜區上拖曳出範圍，此範圍之積分區段則會被選取

磊威科技股份有限公司 Rezwave Technology Inc.

增加滑鼠拖曳敏感度

減少滑鼠拖曳敏感度

重設滑鼠拖曳敏感度

刪除所選取的積分區段

將積分曲線乘 2 顯示

將積分曲線除 2 顯示

於此鍵上壓住滑鼠左鍵上下拖曳，調整積分曲線大小

出現對話框，自行輸入積分曲線倍率值

所有的積分曲線顯示成等高度，並顯示相對倍率值

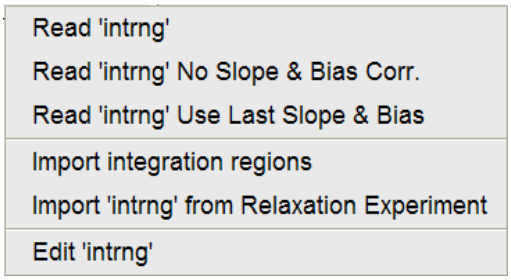
將積分線之底端置於光譜底部

將積分線之底端置於光譜中央

於此鍵上壓住滑鼠左鍵上下拖曳，調整積分曲線位置

刪除全部的積分區段

開啟積分紀錄檔，會出現以下選單：



- **Read 'intrng'**

  讀取積分範圍、斜度(bias)與斜率(slope)之積分文件檔。

- **Read 'intrng' NO Slope & Bias Corr.**

  讀取積分範圍但不載入斜度與斜率數值。

- **Read 'intrng' Use Last Slope & Bias**

  讀取積分範圍，並使用最後一個積分範圍所使用之斜度與

斜率值套用至每一個積分範圍。

- **Import integration regions**

  套用積分範圍文件檔之數值。

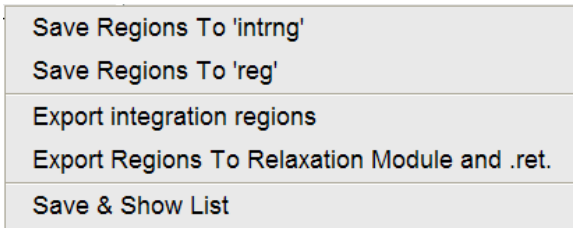
- **Import 'intrng' from Relaxation Experiment**

  套用弛豫分析使用(T_1/T_2/diffusion 實驗)之積分範圍。

- **Edit 'intrng'**

  編輯積分範圍、斜度與斜率之積分文件檔。

儲存目前所定義的範圍區段，會出現以下選單：



- **Save Regions To 'intrng'**

  將積分範圍、斜度(bias)與斜率(slope)等值寫入積分文件檔。

- **Save Regions To 'reg'**

  將積分之範圍存入範圍文件檔，以供其他實驗之用。

- **Export integration regions**

  將積分範圍數值輸出為文件檔。

- **Export Regions To Relaxation Module and .ret.**

  將積分範圍輸出至弛豫分析使用(T_1/T_2/diffusion 實驗)。

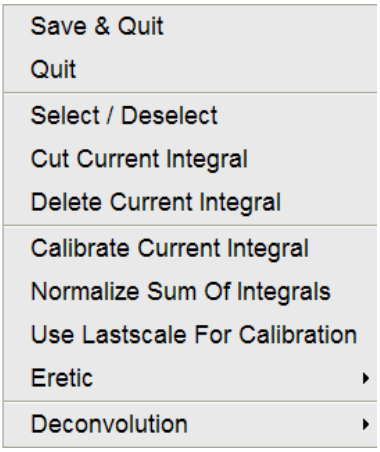
- **Save & Show List**

  儲存積分值，並顯示積分列表。

將積分值存入光譜中並離開此模式

不儲存離開

當完成積分範圍選取後，可將游標紅線移至任一積分區域內並壓下滑鼠右鍵，會出現如下之選單：



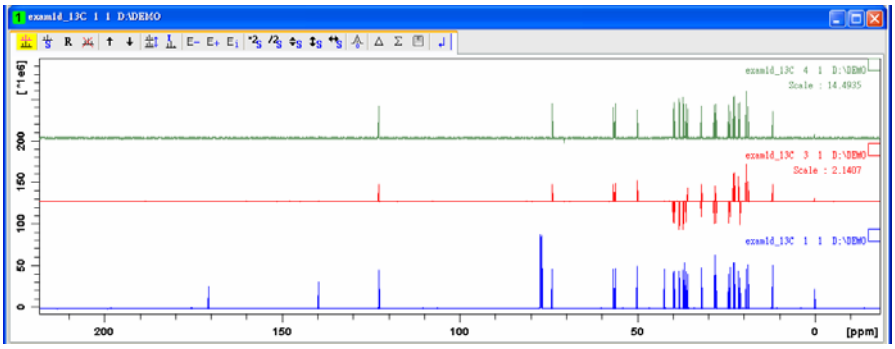
- **Save & Quit**：將積分值存入光譜中並離開此模式，等同於功能鍵。
- **Quit**：不儲存離開積分模式，等同於功能鍵。
- **Select / Deselect**：選擇/取消選擇 此積分區域。
- **Cut Current Integral**：分割此積分區域，等同於功能鍵。
- **Delete Current Integral**：刪除此積分區域。
- **Calibrate Current Integral**：校正此積分區域之積分值，選擇此項後，輸入此積分區域應有之積分值，則全部積分值會以此值為標準而重新計算顯示。
- **Normalize Sum Of Integrals**：正規化所有之積分值，選擇此項後，輸入所有積分區域總和數值，則全部積分值會以此值為總和而重新計算顯示。
- **Use Lastscale For Calibration**：採用上一張光譜的積分值總和為標準，則目前光譜之積分值會以此值為總和而重新計算顯示。
- **Eretic**：利用 NMR 進行樣品絕對定量之技術，請參考**第九章**
- **Deconvolution**：將此積分區域的譜峰進行重疊峰拆解，請參考 **8-2. 重疊峰拆解**。

6. 光譜重疊模式：點選 按鍵或鍵入"**.md**"指令。

將多份光譜重疊比較的方法有二：

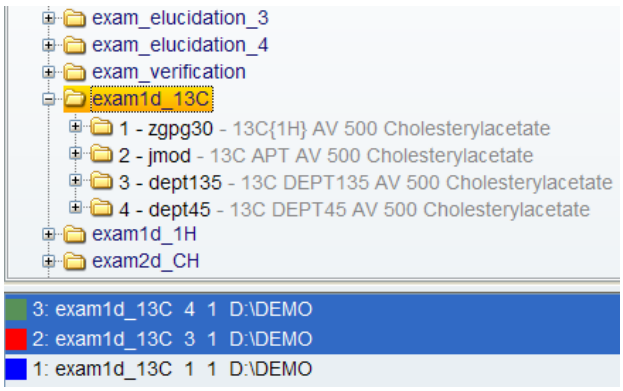
1. 在"data browser"中，將檔案以滑鼠左鍵拖曳進入光譜區
2. 在命令列以"**re**"指令讀入光譜，如鍵入"**re 3 1**"即是讀入 EXPNO = 3, PROCNO = 1 的光譜進行重疊

可出現如下視窗：



在重疊模式下選擇個別光譜的方法有二：

1. 若在分隔顯示模式中(如上圖)，可點擊每個光譜右側方框即可選取，但不可多重選取。
2. 重疊的檔案資訊顯示於檔案瀏覽器的下方，如下圖所示：



其中顯示顏色方框與光譜相關，可直接點擊選取，或使用鍵盤的 Ctrl 鍵或 Shift 鍵進行多重選取。

工具列按鍵：

取消所有選取的光譜

重設所有光譜的大小及位移

將所選取的光譜移除

選取目前已選取光譜的上一張光譜

選取目前已選取光譜的下一張光譜

切換 重疊/分隔 顯示

切換是否顯示光譜各別的檔名、放大率等資訊

設定E−和E+功能鍵的 遞增/遞減 模式，設定如下圖所示：

顯示遞減之光譜

顯示遞增之光譜

將選取光譜乘 2 顯示，若無光譜選取，則所有光譜同時放大

將選取光譜除 2 顯示，若無光譜選取，則所有光譜同時縮小

以拖曳滑鼠方式將選取的光譜進行垂直縮放，若無光譜選取，則所有光譜同時垂直縮放

以拖曳滑鼠方式將選取的光譜進行上下移動，若無光譜選取，則所有光譜同時移動

以拖曳滑鼠方式將選取的光譜進行左右移動，若無光譜選取，則所有光譜同時移動

多重光譜化學位移校正，先將一光譜進行化學位移校正後，再進入光譜重疊模式。重疊光譜後，利用按鍵將各光譜的參考譜峰(溶劑譜峰或 TMS)重疊，按下此功能鍵並選取已做化學位移校正之光譜檔案

顯示目前所有光譜的相減結果

顯示目前所有光譜的相加結果

將 相加/相減 的結果存入一個 PROCNO 中

離開重疊模式

7. 距離量測模式：

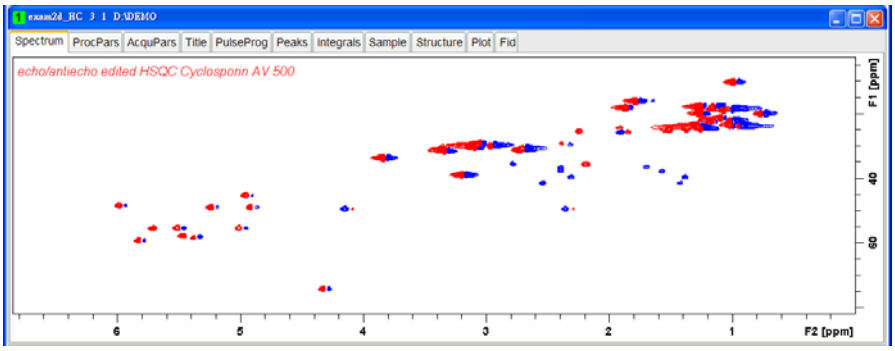
一般進行距離量測，可直接於光譜上壓住滑鼠左鍵拖曳，即可出現距離數值(ppm 與 Hz)，但亦會將光譜放大。另可採用功能鍵，進入距離量測模式，以滑鼠左鍵點選之方式進行量測，當滑鼠游標離開光譜視窗時，即會離開此模式。

第六章 2D 光譜處理操作

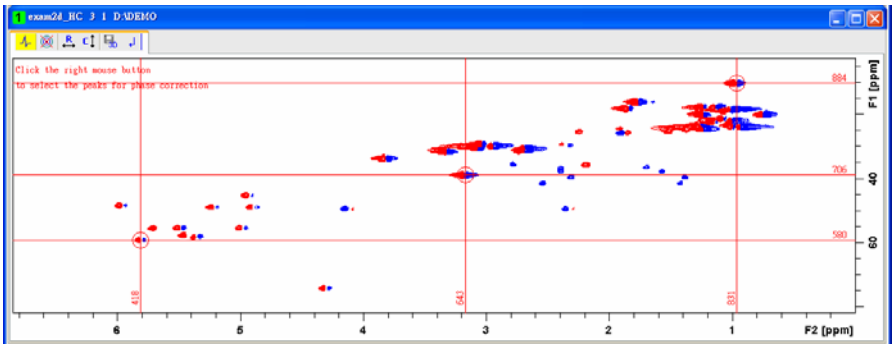
(2D Interactive Manipulation)

光譜處理由 Process 頁面所顯示之功能鍵進行控制。

1. 相位修正模式：點選 Adjust Phase 按鍵或鍵入"**.ph**"指令



一般會於光譜的右上角與左下角各選一個譜峰，或在其他位置加選一個譜峰，而在參考譜峰選取時，建議先將光譜進行放大(於光譜中壓住滑鼠左鍵框選出欲放大之區塊)。在譜峰上按滑鼠右鍵並選擇功能選單中的"Add"，以這些譜峰做為相位調整的參考點，動作完成如下圖：



工具列按鍵：

切換光譜之譜峰顯示與否

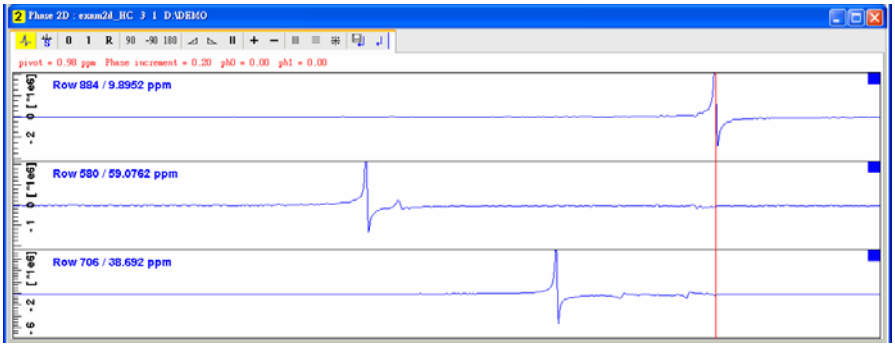
進入橫軸(row)相位調整

進入縱軸(column)相位調整

將相位修正調整結果存入 3D 光譜中

不儲存離開

當進入橫軸或縱軸相位調整模式時，即類似 1D 的相位調整模式，按鍵功能亦相同：



其中增加五個功能鍵：

切換到下一個 1D 光譜

切換到上一個 1D 光譜

將多個相位修正的 1D 光譜以左右並排的方式排列

將多個相位修正的 1D 光譜以上下並排的方式排列

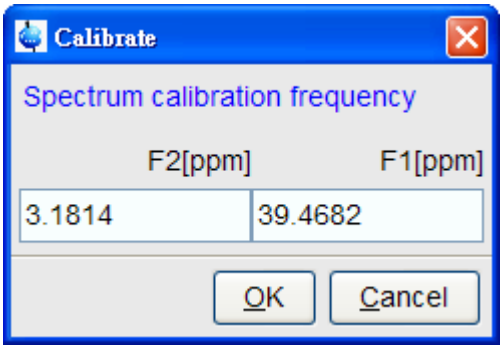
將多個相位修正的 1D 光譜以上下左右的方式排列

將橫軸與縱軸兩個維度個別進行相位調整後，即完成 2D 相位調整。

2. 座標軸校正：點選

按鍵或鍵入**".cal"**指令。

於光譜區上，將十字紅線移到參考訊號上，點擊左鍵即會出現一對話框，填入欲定義的座標值，如圖：



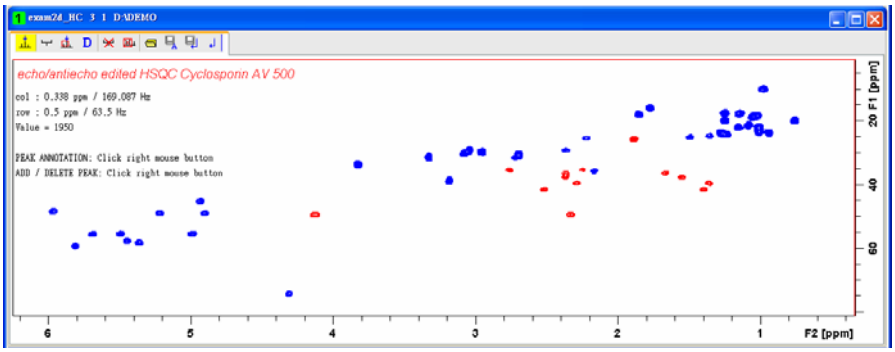
再分別填入兩個軸的校正值，按下 OK 即完成化學位移校正。一般使用"SR"值與 1D 光譜相同，即可達成座標軸校正之目的。

3. 基線調整

一般於 2D 圖譜之基線校正時，分別鍵入"**abs2**"與"**abs1**"或僅鍵入"**abs2D**"，即可將兩軸皆進行基線校正。

4. 譜峰標定

4.1 手動譜峰標定：點選 Pick Peaks 按鍵或鍵入"**.pp**"指令：



可在譜峰上按滑鼠右鍵，並選擇功能選單中的 Add Peak To List 進行手動譜峰標定，或使用功能鍵標定譜峰，當功能鍵呈現黃色底色，即表示此功能運作中，如 代表譜峰標定功能運作中，再點選一次功能鍵，可取消此功能之運作。

工具列按鍵：

點選此模式，利用滑鼠左鍵在光譜區上框選出欲標定譜峰之範圍方框

標定定義方框內之譜峰

將範圍方框內已標定的譜峰進行重疊峰拆解 [**dcon2d**] (重疊峰拆解的詳細方法請參考 **8-2. 重疊峰拆解**)

刪除所有方框

點選此模式，可在光譜區上拖曳出方框，拖出方框後，會出現如下之功能表：

- **Cancel**

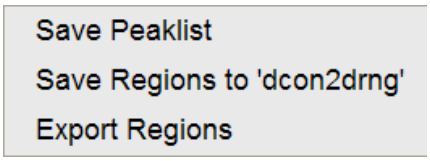
  取消此動作。

- **Delete Peaks Within Defined Region**

  刪除方框內之譜峰標定值。

套用範圍文件檔之數值

按下此按鍵後，會出現如下之功能表：



- **Save Peaklist**

  將譜峰標定值存成檔案(於 PROCNO 資料夾中的"peaklist.xml"檔案)。

- **Save Regions to 'dcon2drng'**

  將所選取之範圍存成檔案(於 PROCNO 資料夾中的"dcon2drng"檔案)。

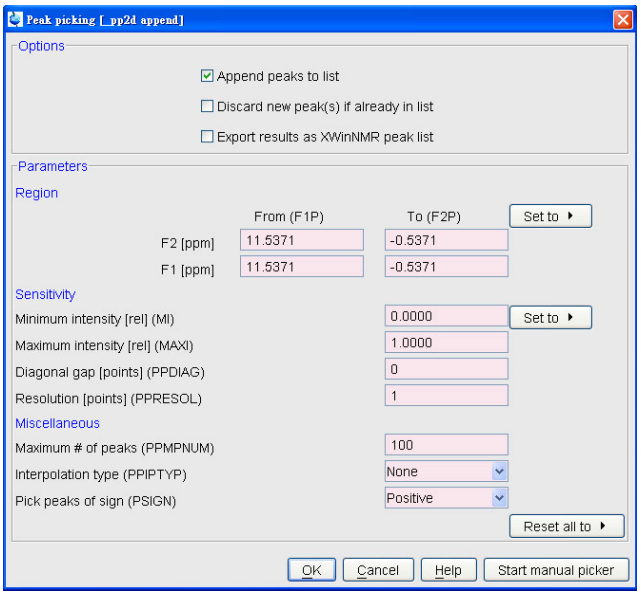
- **Export Regions**

  將選取之範圍輸出為文件檔。

將譜峰標定值存入光譜中並離開此模式

不儲存離開

4.2 自動譜峰標定：由 Pick Peaks → Auto-Pick All [**pp**]會出現如下視窗：



(1) Options：

- **Append peaks to list**：勾選時，會將標定的譜峰以增加的方式加入譜峰標定表中；不勾選時，會將原有標定的譜峰刪除，再將新標定的譜峰加入譜峰標定表中(多次使用自動譜峰標定時，才會顯現此功能用途)。
- **Discard new peak(s) if already in list**：勾選時，會將此範圍內重複標定的譜峰刪除；不勾選時，則不會將此範圍內重複標定的譜峰刪除(於"Append peaks to list"勾選時，此項才可選擇)。
- **Export results as XWinNMR peak list**：勾選時，會增加輸出

磊威科技股份有限公司 Rezwave Technology Inc.

XWin-NMR 所使用的譜峰標定檔案(於 PROCNO 資料夾中的 "peak.txt"檔案)

(2) Parameters：

- **Region**：設定譜峰標定的範圍，亦可由 Set to ▸ 選擇：
  - Full range：全光譜。
  - Displayed Range：目前顯示的光譜範圍。
  - Range defined by stored parameters：以設定於"**edp**"中的"F1P"與"F2P"參數為範圍。
  - Most recent range stored in peak list：設定為上次做譜峰標定的範圍。

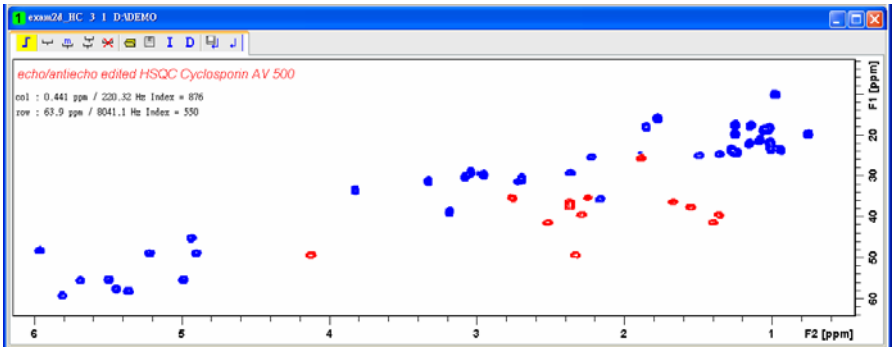
- **Sensitivity**：設定譜峰標定的參數
  - Minimum Intensity [rel] (MI)：設定標定時的最低譜峰強度，可由 Set to ▸ 選擇：
    - Lowest contour level：設定為最低的等高線圈高度，一般使用此項(需先將光譜高度調到合適值)。
    - Value stored in parameter MI：使用設定於"**edp**"中的"MI"參數。
    - Most recent value stored in peak list：設定為上次最低譜峰強度之數值。
  - Maximum Intensity [rel] (MAXI)：設定標定時的最高譜峰強度，一般設定為 1 ($0 < MAXI \leq 1$)。
  - Diagonal gap [points] (PPDIAG)：對具有對角線譜峰之同核二維光譜，設定不標定對角線譜峰之範圍參數，其單位為點數(點數與參數"SI"有關)，數值越大則對角線譜峰附近不進行譜

峰標定的範圍越大。

- Resolution [points] (PPRESOL)：設定譜峰標定的解析度，其單位為點數，數值越大則對相連的譜峰標定個數越少。

- **Miscellaneous**：設定譜峰標定的其他參數
  - Maximum # of peaks (PPMPNUM)：設定譜峰標定的最大數量
  - Interpolation type (PPIPTYP)：設定標定譜峰的方法
    - None：不套用任何方法。
    - Parabolic：使用拋物線的計算方法，較易標定於譜峰中心，當光譜所設定之點數(參數"SI")較少時可選擇此項。
  - Pick peaks of sign (PSIGN)：設定標定譜峰的相位
    - Positive：僅標定正相位的譜峰。
    - Negative：僅標定負相位的譜峰。
    - All：正負相位的譜峰皆標定。

5. 積分模式：點選 Integrate 按鍵或鍵入"**.int**"指令。



當功能鍵呈現黃色底色，即表示此功能運作中，如 代表譜峰標定功能運作中，再點選一次功能鍵，可取消此功能之運作。

工具列按鍵：

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

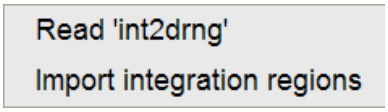
以滑鼠拖曳欲積分範圍

移動積分範圍

複製積分範圍，在此模式下移動任一積分範圍時，即進行範圍複製

刪除所有積分範圍

開啟積分紀錄檔，會出現以下選單：



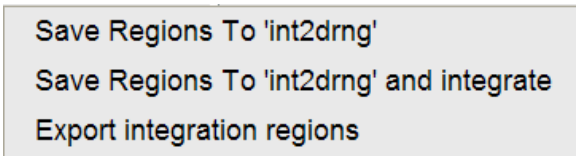
- **Read 'int2drng'**

  讀取積分文件檔之積分相關數值(於 PROCNO 資料夾中的"int2drng"檔案)。

- **Import integration regions**

  套用積分範圍檔之範圍。

儲存目前所定義的範圍區段，會出現以下選單：



- **Save Regions To 'int2drng'**

  將範圍相關數值寫入積分文件檔(於 PROCNO 資料夾中的"int2drng"檔案)。

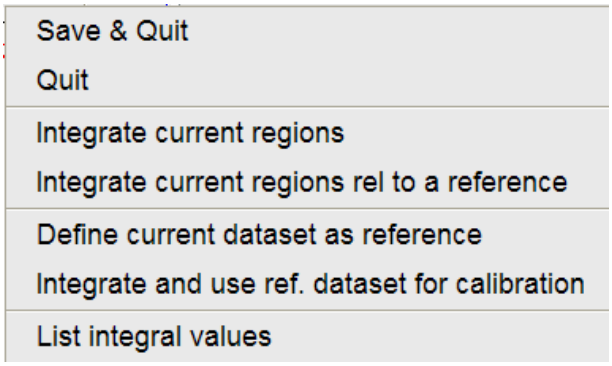
- **Save Regions To 'int2drng' and integrate**

  將範圍與積分相關數值和參數寫入積分文件檔(主要的檔案為於 PROCNO 資料夾中的"int2drng"與"int2d")。

- **Export integration regions**

  將積分範圍儲存成檔案，可提供給其他光譜使用。

定義參考標準值與積分相關功能，會出現以下選單：



- **Save & Quit**

  將積分值儲存並離開此模式，等同於 功能鍵。

- **Quit**

  不儲存離開，等同於 功能鍵。

- **Integrate current regions**

  積分所選取的範圍。

- **Integrate current regions rel to a reference**

  校正積分區域之積分值，選擇此項後，輸入做為積分標準的範圍編號，再輸入此積分區域應有之積分值，則全部積分值會以此值為標準而重新計算顯示。

- **Define current dataset as reference**

  定義目前的光譜積分範圍與數值為其他光譜之標準。

- **Integrate and use ref. dataset for calibration**

  以定義為標準的光譜進行積分值校正。

- **List integral values**

  列出積分相關數值。

將範圍方框內已標定的譜峰進行重疊峰拆解 [**dcon2d**] (重疊峰拆解的詳細方法請參考 **8-2. 重疊峰拆解**)

將積分值儲存並離開此模式

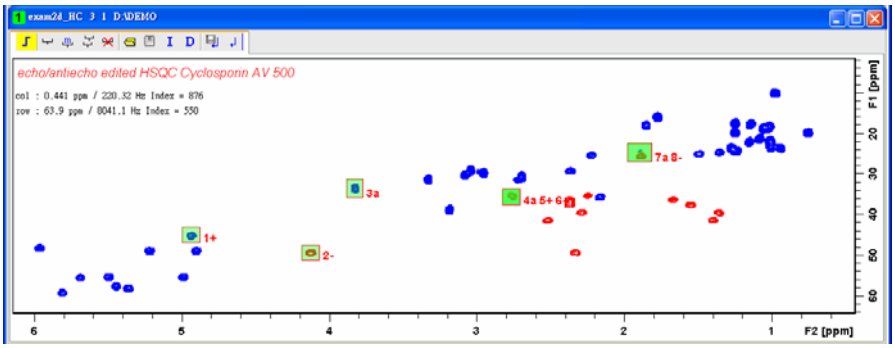
不儲存離開

2D 光譜積分步驟如下：

(1) 於選取積分範圍之功能運作中(功能鍵顯示為)時，按下滑鼠右鍵拖曳出範圍後，會出現以下之選項：

- **Cancel**：取消此積分範圍
- **Integrate:a**：顯示此範圍內正、負譜峰之積分總和
- **Integrate:+** ：顯示此範圍內正譜峰之積分總和
- **Integrate:-** ：顯示此範圍內負譜峰之積分總和
- **Integrate:a + -**：分別顯示此範圍內正、負譜峰之積分總和、正譜峰之積分總和與負譜峰之積分總和三個積分數值
- **Integrate:a +**：分別顯示此範圍內正、負譜峰之積分總和與正譜峰之積分總和兩個積分數值
- **Integrate:a -**：分別顯示此範圍內正、負譜峰之積分總和與負譜峰之積分總和兩個積分數值
- **Integrate:+ -**：分別顯示此範圍內正譜峰之積分總和與負譜峰之積分總和兩個積分數值

當選擇完成後，會於選取範圍旁出現編碼與積分種類，如下圖所示：

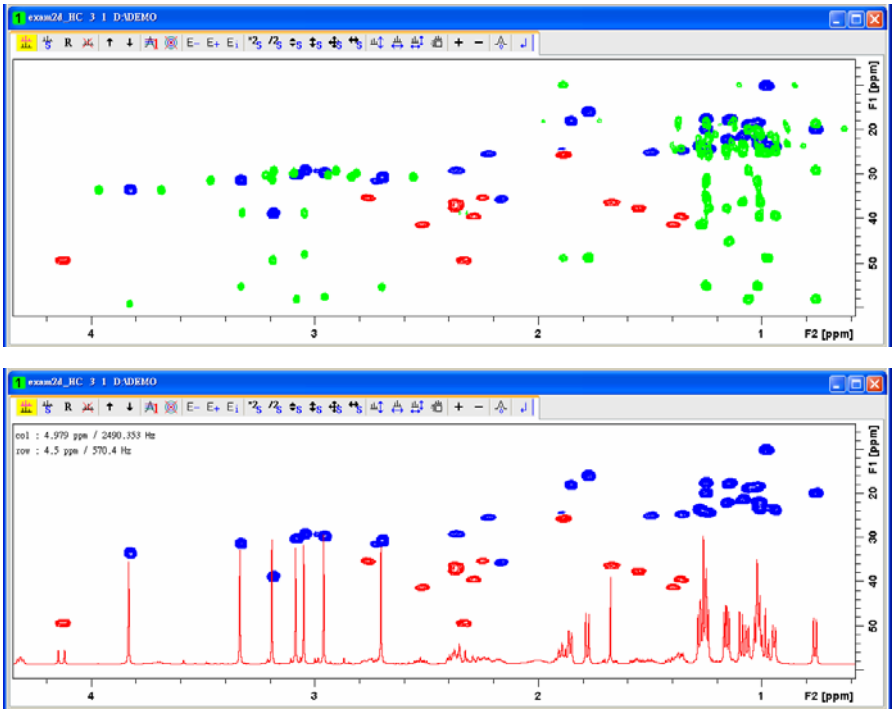


(2) 按下 I ，選擇"Integrate current regions"即會對選取之範圍進行積分。

(3) 按下 I ，選擇"List integral values"即會顯示目前積分數值之結果。

6. 光譜重疊模式：點選 按鍵或鍵入**".md"**指令。

將多份光譜重疊比較，選擇光譜的方法與 1D 光譜相同，但於 2D 光譜中可做 2D 與 2D、1D 與 2D 的重疊，如下圖：

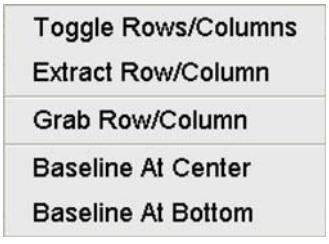


當進入光譜重疊模式時，即類似 1D 的光譜重疊模式，按鍵功能亦相同，其中增加之功能鍵為：

將所有光譜的等高線參數設成與第一張光譜相同

切換第一張光譜之譜峰顯示與否

點選此模式，滑鼠在圖譜上移動會顯示游標處橫軸(row)的 1D 圖像，轉動滑鼠滾輪可調整 1D 圖像大小，此時按滑鼠右鍵可出現選單：



● **Toggle Rows/Columns**

切換橫軸與縱軸之 1D 光譜顯示。

- **Extract Row/Column**

  將 1D 光譜另存至一個 PROCNO 中。

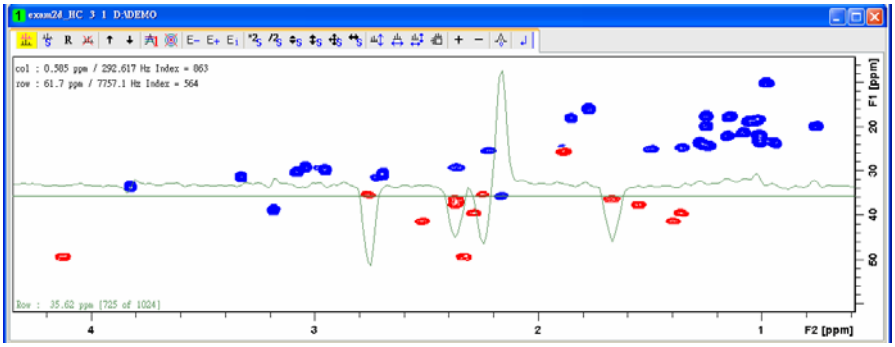
- **Grab Row/Column**

  固定顯示此時掃瞄所獲得之 1D 光譜。

- **Baseline At Center 或 Baseline At Bottom**

  控制 1D 光譜的基線位置於中間或在下方。

顯示結果如下：



點選此模式，滑鼠在圖譜上移動會顯示游標處縱軸(column)的 1D 圖像，其餘功能與相同

點選此模式，滑鼠在圖譜上移動會同時顯示游標處橫軸(row)與縱軸(column)的 1D 圖像，其餘功能與相同

進入計算投影模式，可將橫軸或縱軸維度的投影量存至一個 PROCNO 中 [**proj**]

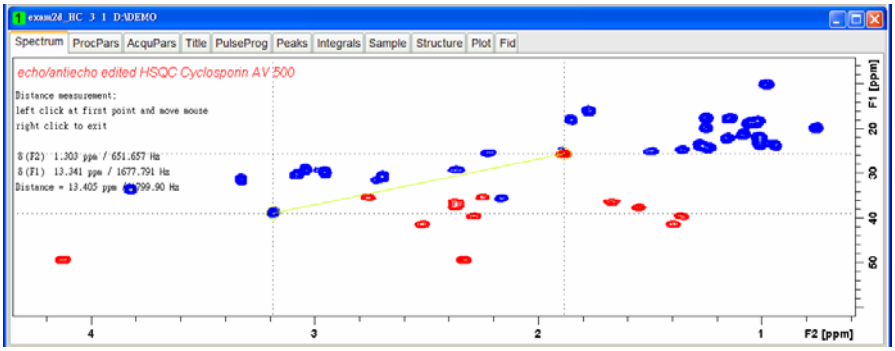
當執行"Grab Row/Column"獲得 1D 時，以此按鍵來調整所顯示的層數往上移動

當執行"Grab Row/Column"獲得 1D 時，以此按鍵來調整所顯示的層數往下移動

7. 距離量測模式：點選 按鍵。

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

進入距離量測模式後，以滑鼠左鍵點選的方式進行量測，可出現橫向、縱向與直線間之距離數值(ppm 與 Hz)，當滑鼠游標離開光譜視窗時，即會離開此模式。



第七章 列印/輸出 (Printing/Exporting Data)

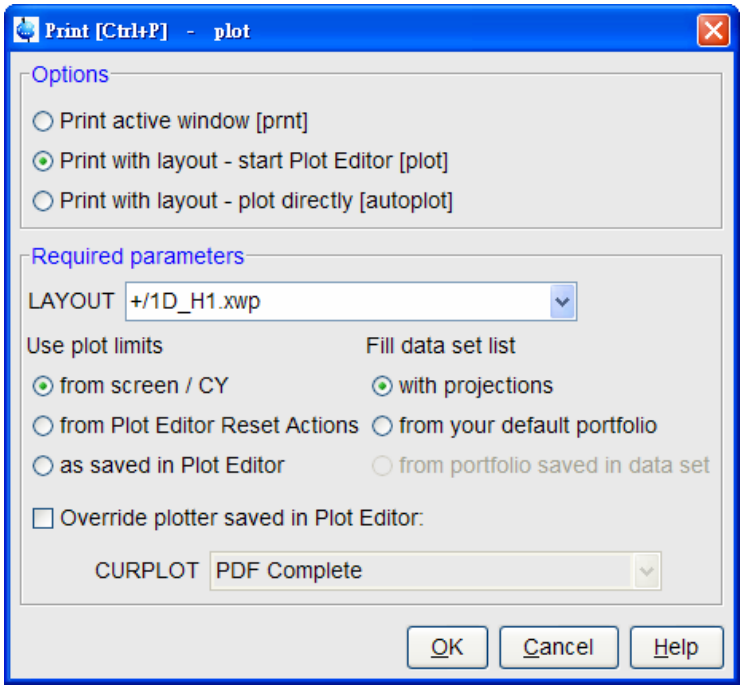
7-1. 使用 Plot 頁面進行光譜列印

將光譜調整完成後，鍵入"**edp**"指令(或由標籤區中選擇 ProcPars 之頁面)，由參數"LAYOUT"選擇合適之範本檔，再選擇標籤區中的"Plot"頁面進行列印("Plot"頁面的詳細功能請參考 **4-1. 3.10 Plot**)

7-2. 光譜列印

有四種方式可進入列印模式

- 按下 按鍵
- 由主功能表→ Publish → Print
- 鍵入"**print**"指令
- 同時按下鍵盤中的"Ctrl"與"P"按鍵



1. Options：

- **Print active window [prnt]**

將目前 TopSpin 視窗所顯示的光譜直接列印。

- **Print with layout - start Plot Editor [plot]**

  進入"Plot Editor"視窗，即使用 TOPSPIN Plot Editor 程式，此時會套用"LAYOUT"的格式再進一步編輯。(關於編輯部份與 TOPSPIN Plot Editor 的程式應用，請參閱程式中的"Help"說明)。

- **Print with layout – plot directly [autoplot]**

  套用"LAYOUT"格式，直接將光譜輸出。

2. LAYOUT：此欄位可選擇圖譜列印範本檔，用以套用列印格式。除預設的範本檔，亦可自行在 TOPSPIN Plot Editor 程式中建立並儲存自己設定的範本檔。

3. Use plot limits：選擇光譜邊界與高度設定的方法

- **from screen/ CY**

  當"**edp**"中參數"F1P"、"F2P"和"CY "未設定時(= 0)，即使用 TopSpin 顯示之範圍與高度做為列印標準；當設定三個參數時(≠ 0)，使用參數所設定之數值做為列印標準。

- **from Plot Editor Reset Actions**

  使用 TOPSPIN Plot Editor 程式中"Automation Reset Actions"功能設定之範圍與高度做為列印標準(於 TOPSPIN Plot Editor 程式的光譜中壓滑鼠右鍵，並選擇"Automation..."可進行設定)。

- **as saved in Plot Editor**

  使用"LAYOUT"格式內所儲存之範圍與高度做為列印標準。

7-3. 光譜複製與輸出

1. 光譜複製：於主功能表選擇 Publish → Copy 或鍵入"**copy**"指

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

令，可將目前 TopSpin 的光譜複製到 Windows 的剪貼簿中，而於其他文書編輯程式(如 Word)即可使用"貼上"功能，將光譜圖像進行複製。

2. 光譜輸出：於主功能表選擇 Publish → PDF 或鍵入 "**exportfile**"指令，再鍵入檔案輸出的位置與檔名，即可將光譜輸出成圖形檔案，可輸出的格式為：*.png、*.jpg、*.jpeg、*.bmp、*.pdf。

7-4. 積分值與譜峰標定值之列印

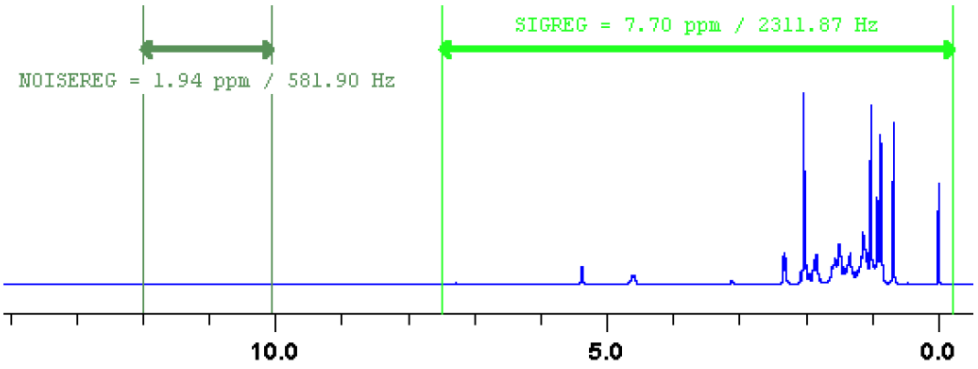
於光譜視窗中，將頁面切換到積分頁面或譜峰標定值頁面，再於命令列中輸入"**print**"或於頁面中壓滑鼠右鍵，於功能表中選取"Print..."即可列印。

第八章 光譜分析 (Analysis)

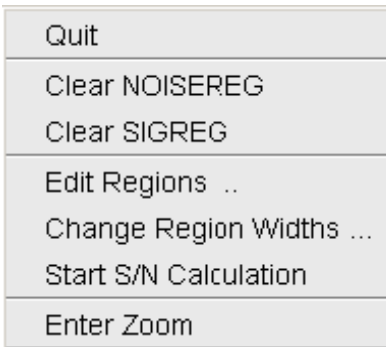
8-1. 訊雜比計算 (Signal to Noise Calculation)

由主功能表選擇 Analyse → Tools → "Signal/Noise ratio: Setup" [**.sino**]，進入訊雜比計算模式。

壓住滑鼠左鍵，並拖曳一段範圍做為訊號範圍，再拖曳一段範圍做為背景雜訊範圍。訊號範圍涵蓋欲計算的訊號，背景雜訊範圍則選取平坦沒有訊號的背景區段即可。舉例如下圖：



選擇區段後，按滑鼠右鍵會出現功能表：



- **Quit**：離開訊雜比計算模式。
- **Clear NOISEREG**：取消所選取的雜訊範圍。
- **Clear SIGREG**：取消所選取的訊號範圍。
- **Edit Regions**：手動輸入訊號或雜訊範圍。

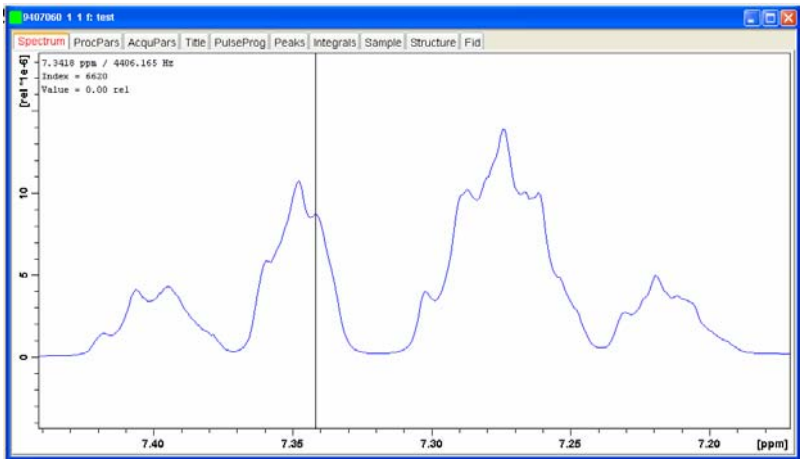
- **Change Region Widths**：改變所選取範圍的寬度。
- **Start S/N Calculation**：開始進行訊雜比計算。
- **Enter Zoom**：進入光譜放大模式，此時按下滑鼠左鍵拖曳，為光譜左右之放大功能；若在此模式中按下滑鼠左鍵並選取"Exit Zoom"，則會回到訊雜比計算模式。

8-2. 重疊峰拆解 (Deconvolution)

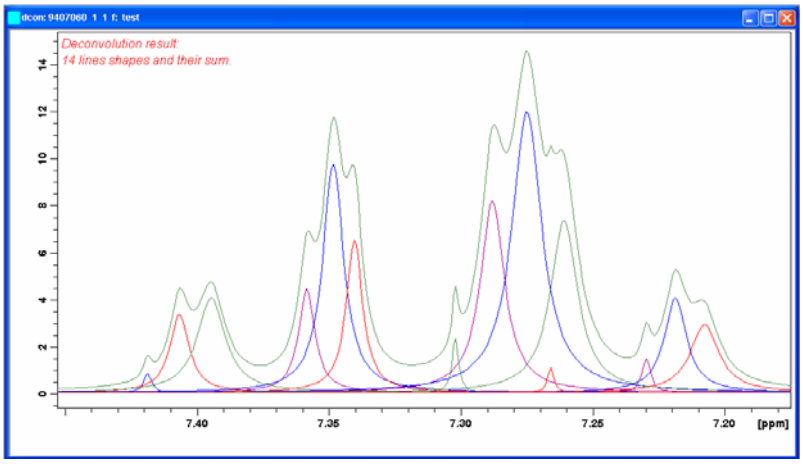
1. 1D 光譜重疊峰拆解

其使用目的是將相互重疊的譜峰，利用 Gaussian 或 Lorentzian 曲線將每個譜峰進行區分，藉以獲得各譜峰之積分值，如圖所示：

- 重疊的光譜：

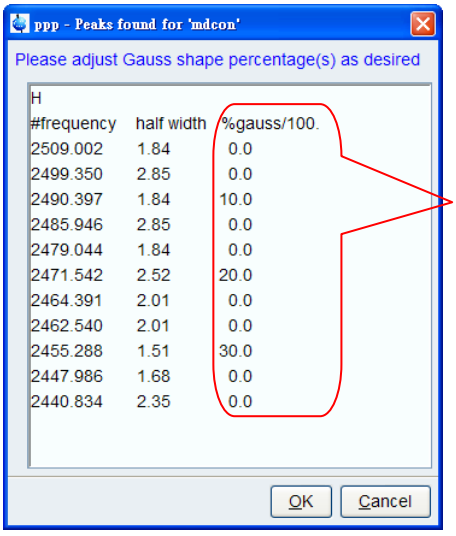


- 重疊峰拆解結果圖：



將顯示範圍移到需要執行重疊峰拆解的範圍，再由主功能表選擇 Analyse → Line Shapes → "Fit Lorentz/Gauss Function"或鍵入"**dcon**"指令顯示重疊峰拆解流程按鍵：

1. **Destination**：設定重疊峰拆解結果所存入的 PROCNO。
2. **Def. Peaks**：進入譜峰標定模式進行譜峰標定(標定方法請參考 5-2. 4. 譜峰標定)，標定完成後按下 ，並選擇"Save Peaklist for Deconvolution"之選項，再按下 按鍵離開譜峰標定模式。
3. **View Peaks**：顯示譜峰的位置與半高寬，並可修改 Gaussian 函數所佔之比例，如下圖所示：



4. **Params**：
   - Computation range per line [**azfw**]：設定譜峰間的最小距離。
   - Integral factor [**cy**]：設定譜峰的最高高度。
5. **Start Fit**：開始進行重疊峰拆解計算。
6. **View Fit**：
   - **View Fit Overlayed**：顯示最後一次重疊峰拆解的結果(以重疊圖

形顯示)。

- **View Numerical Result**：顯示最後一次重疊峰拆解的數據結果(以文字顯示)。
- **View Fitted Shapes**：顯示最後一次重疊峰拆解的譜峰區分結果(以圖形顯示)。

利用 Back 按鍵退出重疊峰拆解模式。

2. 2D 光譜重疊峰拆解

將顯示範圍移到需要執行重疊峰拆解的範圍，再由主功能表選擇 Analyse → Line Shapes → "Fit Lorentz/Gauss Function"或鍵入"**dcon**"指令顯示重疊峰拆解流程按鍵：

1. Destination：設定重疊峰拆解結果所存入的 PROCNO。

2. Def. Peaks：進入譜峰標定模式進行譜峰標定(標定方法請參考 **6 4. 譜峰標定**)，標定完成後按下 ，並選擇"Save Regions to 'dcon2drng'"之選項，再按下 按鍵離開譜峰標定模式。

3. Params：

- Gauss percentage for mixed shape：設定 Gaussian 函數所使用之比例(使用混合函數運算時，設定之數值才有作用)。
- Set save individual peak shapes：設定為"yes"時，會將每一個譜峰做重疊峰拆解的結果個別存於不同的 PROCNO 中。
- Marquardt stop cirteria：設定演算停止準則。
- Set memory optimization：設定記憶體(Memory)使用情況做為計算之最佳化。

- Set speed optimization：設定以速度(Speed)做為計算之最佳化。

4. Start Fit：

- **Use Lorentzian shape**：使用 100% Lorentzian 函數進行運算。
- **Use Gaussian shape**：使用 100% Gaussian 函數進行運算。
- **Use mixed shape**：使用混合函數進行運算。

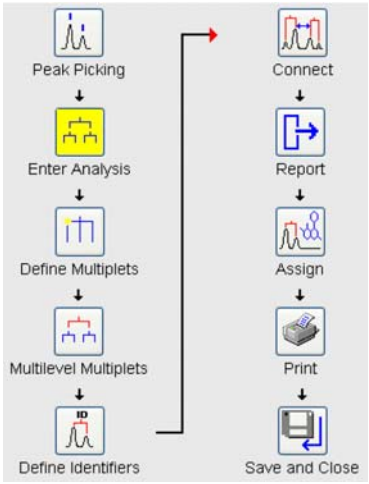
5. View Fit：

- **View Fit Overlayed**：顯示最後一次重疊峰拆解的結果(以重疊圖形顯示)。
- **View Numerical Result**：顯示最後一次重疊峰拆解的數據結果(以文字顯示)。

利用 Back 按鍵退出重疊峰拆解模式。

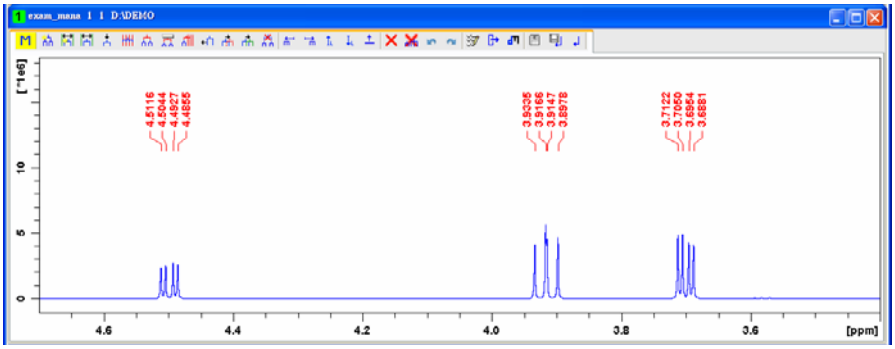
8-3. 偶合常數分析 (Multiplet Analysis)

此功能可進行偶合常數的計算，並可依據偶合常數尋找譜峰間的關連性，亦可將其結果輸出為論文格式。更詳細的說明與步驟，請參考"Structure Analysis Tools" (由主功能表 → ? → Manuals 中選取)。由主功能表選擇 Analyse → Multiplets 或鍵入"**mana**"指令進入偶合常數分析模式；亦可由主功能表選擇 Analyse → Multiplets → "Multiplet Analysis Workflow"或鍵入"**managuide**"指令，會出現偶合常數分析小幫手之視窗：



1. Peak Picking：進行譜峰標定，亦可於進入小幫手前先做譜峰標定，而於小幫手中跳過此步驟。

2. Enter Analysis：進入偶合常數的計算模式，亦可鍵入"**mana**"指令進入此模式：

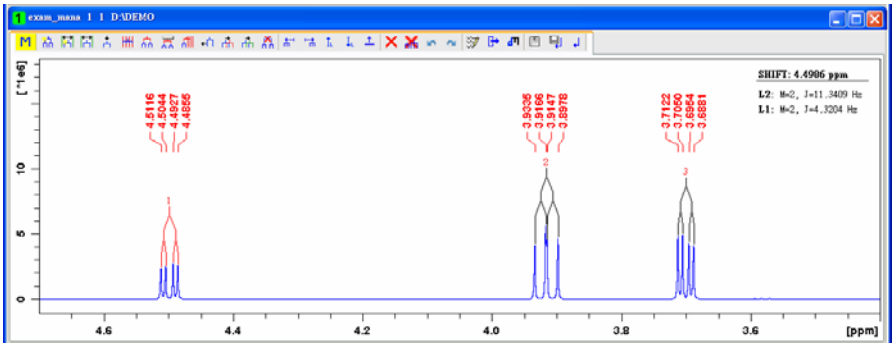


3. Define Multiplets：定義分裂模式

(1) Automatic Definition：自動定義分裂模式

- **Displayed spectrum range**：將目前所顯示之光譜範圍內之譜峰自動進行分裂模式定義，等同於按鍵之功能。
- **Region**：壓住滑鼠左鍵進行拖曳選取範圍後，自動定義分裂模式，等同於按鍵之功能。

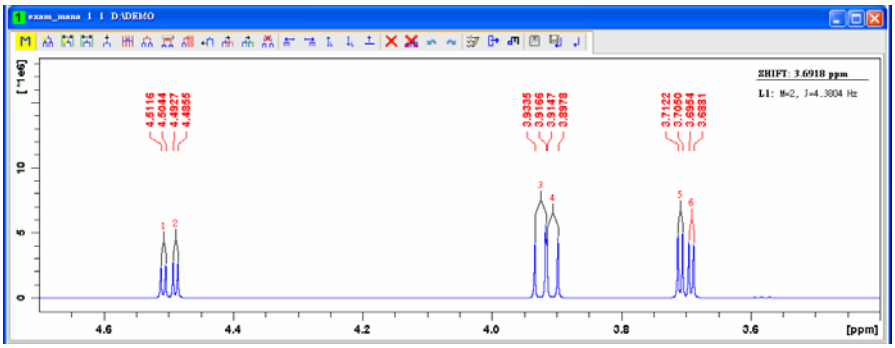
定義完成後之範例如下：



(2) Manual Definition：手動定義分裂模式

- **By region**：壓住滑鼠左鍵拖曳選取範圍後，會將範圍內具譜峰標定之譜峰定義為同一個分裂模式，等同於按鍵之功能。
- **Manually**：手動定義分裂模式，以滑鼠左鍵點出每個譜峰的位置，再按滑鼠右鍵出現選單，選擇"Define Multiplet"，會將選取之譜峰定義為同一個分裂模式，等同於按鍵之功能[註六]。
- **Free Grid**：以等距格線定義分裂模式，先按滑鼠右鍵出現選單，選擇譜峰分裂之數量，再將游標移至譜峰群最中間並按下滑鼠左鍵，移動滑鼠即會出現與設定之譜峰分裂數量相等的等距格線，並將每個格線的位置調至每個譜峰的峰頂，再按一次左鍵即完成定義，此功能等同於按鍵之功能。

定義完成後之範例如下：



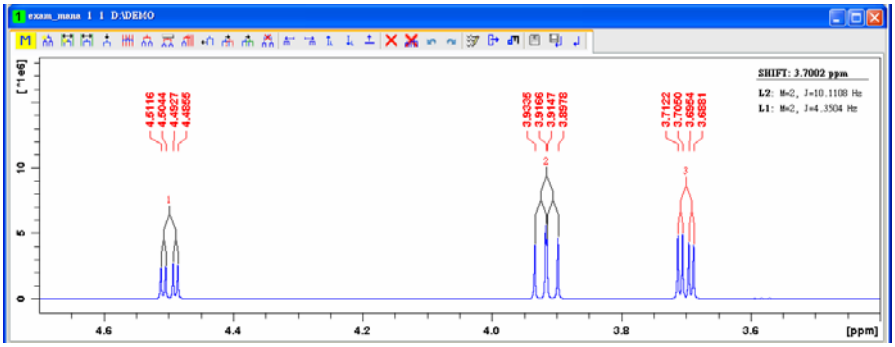
※註六：關於此方法更詳細的說明，請參考"1D and 2D Step-by-Step-Advanced" (由主功能表 → → Manuals 中選取)。

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

4. Multilevel Multiplets：合併偶合分裂模式

- **Couple Existing Multiplets**：將已存在的偶合分裂再合併成一個偶合分裂叢集，將欲合併的偶合分裂以滑鼠左鍵選取，選取之分裂線會呈現紅色，再按滑鼠右鍵選"Define Multiplet"，即可將所選取的偶合分裂進行合併，等同於 按鍵之功能。
- **Coupled Grid**：以等距格線合併已存在的偶合分裂成一個叢集。先以滑鼠左鍵選取其中一個偶合分裂標示，再點選此按鈕，則會出現與此偶合分裂相同分裂數的格線，將其放置於另一個偶合分裂對齊再按左鍵即可，而按滑鼠右鍵可選擇分裂的數目，等同於 按鍵之功能。

合併完成後之範例如下：



工具列按鍵

以輸入偶合分裂編號的方式，將其合併成一個偶合分裂叢集，如將編號 3、4 的偶合分裂合併，按下此鍵後輸入"3,4"

將分裂定義之單一樹狀標示做左右移動，再點選此按鍵則離開移動模式

將分裂定義之整組樹狀標示做左右移動，再點選此按鍵則離開移動模式

將分裂定義之整組樹狀標示複製並可做左右移動，再點選此按

鍵則離開移動模式

刪除已合併的偶合分裂叢集標示

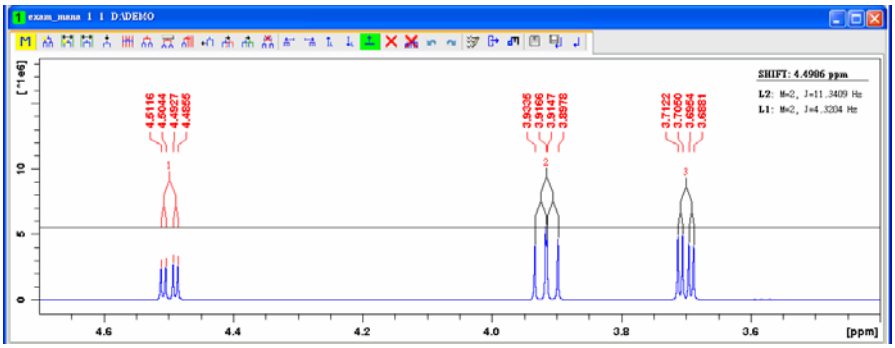
選擇減少編號之偶合分裂

選擇增加編號之偶合分裂

選擇偶合分裂叢集的上一個階層標示

選擇偶合分裂叢集的下一個階層標示

調整偶合分裂標示的水平高度。先以滑鼠左鍵選取其中一個偶合分裂標示，再點選此按鈕，移動橫線至新的水平高度，壓下滑鼠左鍵即可移動標示。再點選此按鍵則離開移動模式，其結果如下圖所示：



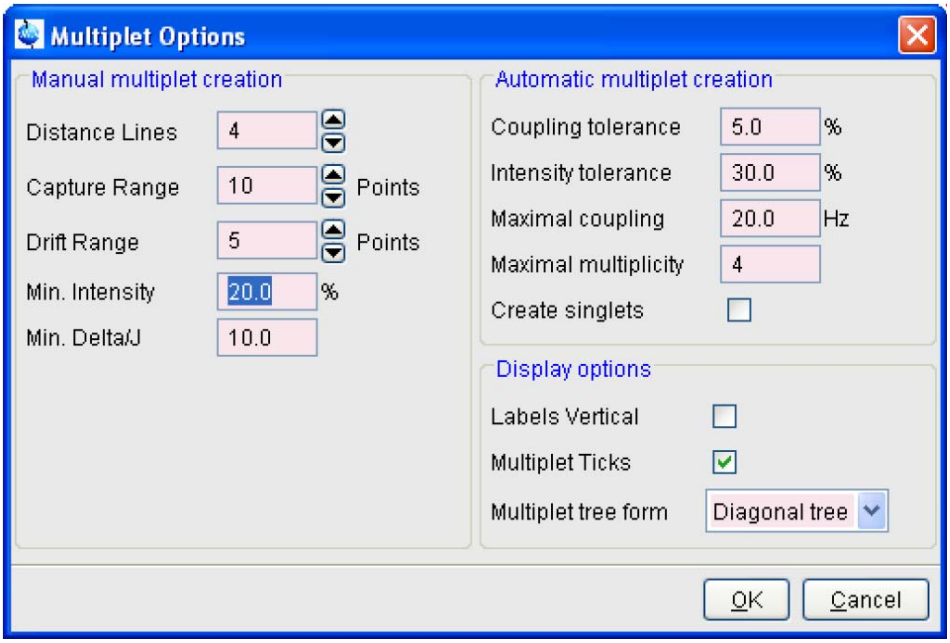
刪除所選擇的偶合分裂

刪除所有的偶合分裂

取消最後一次的動作

重做最後一次的動作

調整定義偶合分裂的參數值，會出現如下視窗：



(1) Manual multiplet creation

此欄參數影響、與之功能，一般不需做更改。

(2) Automatic multiplet creation

此欄參數影響與之功能，藉由參數之更改，可提高自動定義分裂模式之準確度。

- **Coupling tolerance**

  偶合常數之寬容值，程式自動認定在此百分比內為相同之偶合常數，而進行搜尋與關聯。如一偶合常數為 10 Hz，而將此參數設定為 5%，則 9.5 ~ 10.5 Hz 之偶合常數都將認定為相同。

- **Intensity tolerance**

  譜峰強度之寬容值，程式自動認定在此百分比內為相同之分裂群組。如一譜峰強度為 10，而將此參數設定為 30%，則強度 7 ~ 13 之譜峰都可被認定為相同之分裂群組。

- **Maximal coupling**

  設定光譜中最大之偶合常數。

● **Maximal Multiplicity**

設定光譜中最多之譜峰分裂數目。

● **Create singlets**

開啟或關閉標定單一譜峰(singlet peak)之功能。

(3) Display options

變更顯示樣式之參數。

● **Labels Vertical**

將標示之數字以水平或垂直方向顯示。

● **Multiplet Ticks**

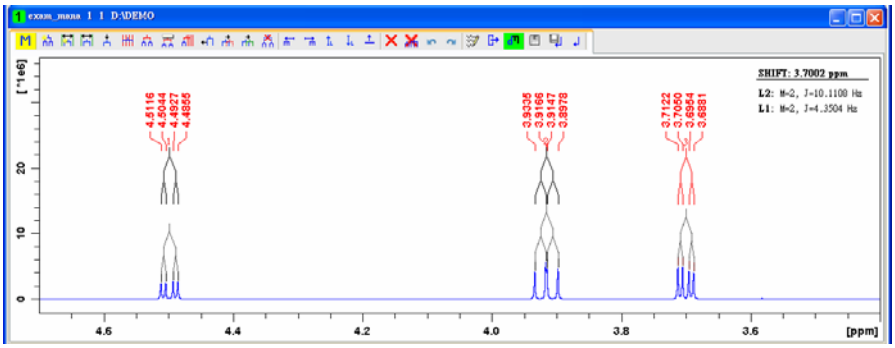
顯示標示於定義分裂之譜峰上。

● **Multiplet tree form**

選擇標示的形式，可選擇斜線之樹狀模式(Diagonal tree)或直角之樹狀模式(Square tree)。

檢視報告，並可利用偶合常數尋找譜峰間之關聯性，亦可將關聯性顯示成論文格式，有 JMR (Journal of Magnetic Resonance) 與 JPF (Japanese Patent Format)格式可選擇

若使用過"Daisy"程式進行光譜模擬，按下此鍵則會於光譜上方顯示模擬的分裂結果提供比對，再點選此按鍵則離開此比對模式，範例如下：



儲存偶合常數分析結果

儲存偶合常數分析結果並離開此模式

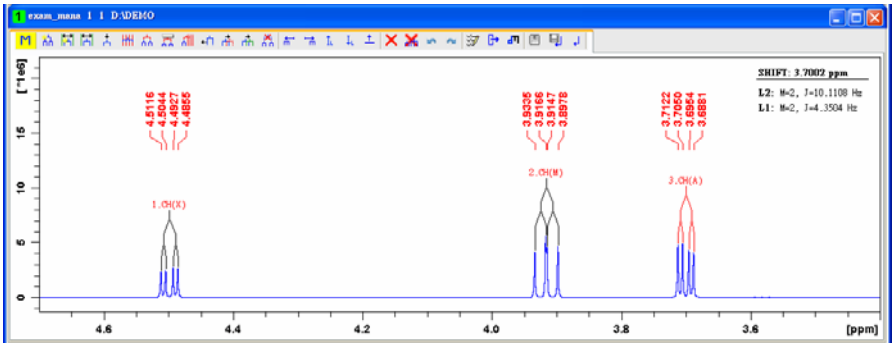
不儲存並離開此模式

5. Define Identifiers：定義分裂標示的編碼，依下述步驟進行編碼：

(1) 以滑鼠左鍵選取欲定義編碼之分裂標示

(2) 壓滑鼠右鍵選取選單中之"Define Multiplet Identifier"

(3) 於出現之對話框的"Identifier"欄位中填入新的編碼，編碼可為數字或英文，編碼完成後之範例如下：

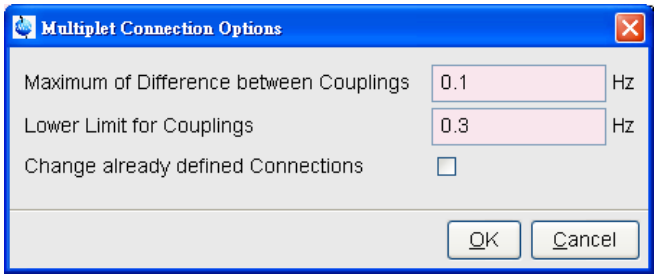


6. Connect：依據偶合常數尋找分裂間的關聯性。

6.1 自動搜尋關聯性

(1) 按下 功能鍵

(2) 按下 Find Connections 之按鍵，會出現參數設定對話框：



- **Maximum of Difference between Couplings**

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

設定關聯間最大的偶合常數誤差值。如設定為 0.1 Hz，則程式僅會將 9.9 ~ 10.1 Hz 的偶合常數設為有關聯。

- **Lower Limit for Couplings**

  設定最低的偶合常數，低於此設定之數值之偶合常數，則程式將不會進行關聯搜尋。

- **Change already defined Connections**

  是否要覆蓋原有定義的關聯性。

(3) 按下 OK 後，則自動進行偶合常數關聯性的搜尋，並將結果顯示於報告中。

6.2 手動建立關聯性

6.2.1 以光譜手動建立關聯性

(1) 以滑鼠左鍵於光譜中選擇一個欲關聯的分裂顯示，若其具多層分裂顯示(為一個分裂叢集)，需使用 或 功能鍵選取。

(2) 按下滑鼠右鍵選擇"Designate Multiplet" (若之前已有關聯定義，需先選擇"Disconnect Multiplets")。

(3) 再以滑鼠左鍵於光譜中選擇另一個欲關聯的分裂顯示，若其具多層分裂顯示(為一個分裂叢集)，需使用 或 功能鍵選取。

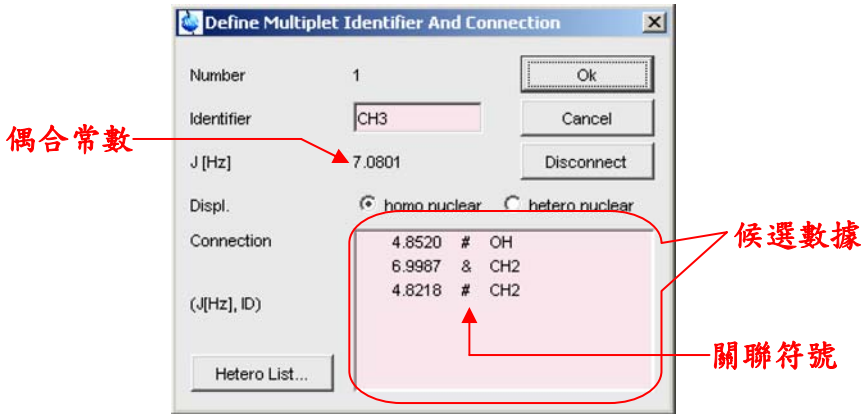
(4) 按下滑鼠右鍵選擇"Connect Multiplets"，即可於報告中顯示關聯性。

6.2.2 以偶合常數數據手動建立關聯性

(1) 按下 功能鍵。

(2) 以滑鼠左鍵雙擊一個欲關聯的分裂數據，可出現如下視窗：

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.



(3) 在候選數據中以滑鼠左鍵雙擊另一個欲關聯的分裂數據，即可即可於報告中顯示關聯性。

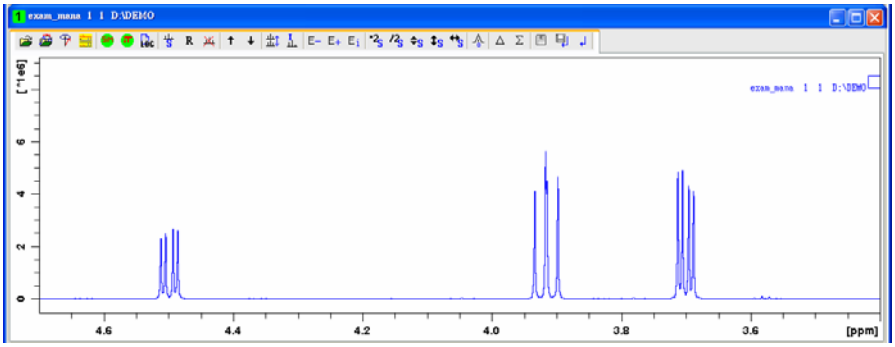
[附註] 關聯符號說明

- ●# ：已具關聯，與目前選擇之分裂數據不屬相同叢集
- ●! ：已具關聯，與目前選擇之分裂數據屬於相同叢集
- ●& ：已具關聯，與目前選擇之分裂數據關聯
- ●> ：不具關聯，與目前選擇之分裂數據最接近

7. Report：等同於 按鍵之功能。

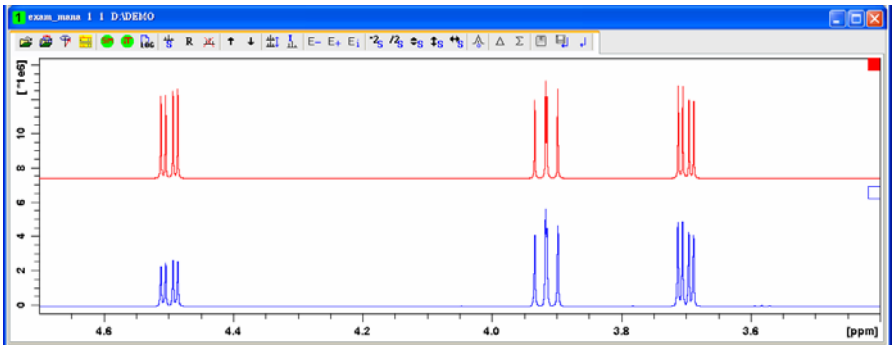
8-4. Daisy 光譜模擬程式

此功能可將進行偶合常數計算的結果模擬出 1D 光譜，便於進行比對，亦可使用輸入的方式，進行 1D 光譜之模擬。更詳細的說明與步驟，請參考"Daisy" (由主功能表 → → "Manuals"中選取)。由主功能表選擇 Analyse → Simulate → "Simulation/Iterate 1D spectrum"或鍵入"**daisy**"指令，即可進入 Daisy 光譜模擬程式，其介面如下：



於完成偶合常數分析後，可依下述步驟進行光譜模擬：

1. 按下 功能鍵，輸入已完成偶合常數分析的檔案路徑。
2. 按下 功能鍵，執行光譜模擬，模擬後的光譜儲存於內定之檔案路徑中(PROCNO = 999)，且自行進行疊圖顯示，如下圖所示：



其中下層光譜(藍色)為原有之光譜；上層光譜(紅色)為模擬之光譜。

工具列按鍵：

開啟自旋系統(spin system)檔案，可開啟四種檔案格式：

- Daisy 程式之檔案(*.mgs)
- NMR-SIM 程式之檔案(*.ham)
- ACD 光譜預測程式之檔案(*.acd)
- Perch 光譜預測程式之檔案(*.prcp)

由 TopSpin 的檔案中開啟偶合常數分析結果

建立或修改自旋系統

進階參數輸入或修改

進行光譜之模擬(simulation)

進行光譜之迴圈計算(iteration)

以文字顯示計算結果

其餘按鍵功能相同於光譜重疊模式之按鍵功能，詳細說明請參考 **5-2. 6. 光譜重疊模式**

第九章 數位定量 (Digital Eretic)

數位定量(Digital Eretic, Eretic = Electronic Reference To Access In Vivo Concentration)是將已知濃度樣品的 ^{1}H 光譜作為標準，再藉由光譜處理的方法獲得未知樣品絕對濃度之技術，亦即不需在樣品中加入已知濃度的內標參考物就可計算未知物的絕對濃度。進行數位定量必須先完成兩項校正：

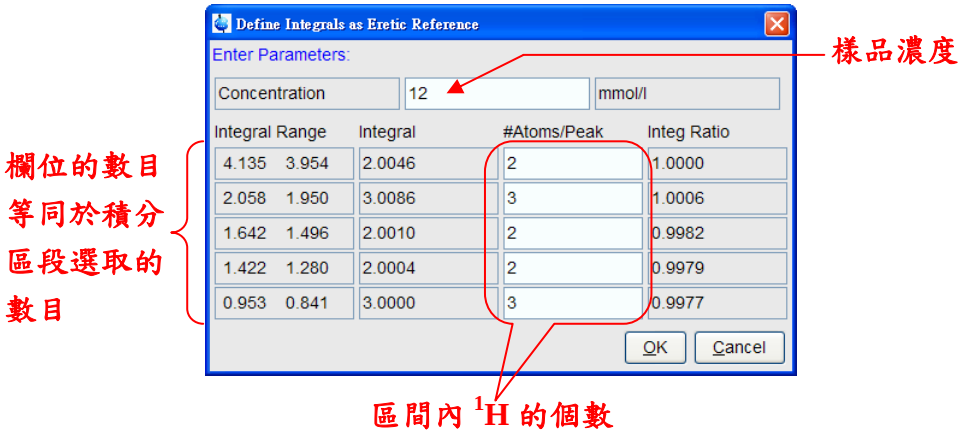
1. 已知濃度樣品校正，使用之濃度單為 mmole/L，此項必須自行校正，亦可使用多種已知濃度的樣品進行校正，以提供未知濃度樣品的定量。
2. 接收器增益(receiver gain)校正，亦即 RG 的 cortab (setup acquisition correction table) 校正，一般新儀器於出廠時皆已完成此項校正，若無做此項校正，則在偵測未知物濃度時，必須使用與已知濃度樣品相同的接收器增益值(RG 值)進行實驗。

對數位定量實驗的方法與參數建議為：

1. 良好的共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching) (若使用 ATM 探頭，可使用"**atma exact**"指令進行自動調整)。
2. 良好的勻場。
3. 合適的 ^{1}H 90°脈衝(可使用"**pulsecal**"指令進行自動調整)。
4. 足夠的弛豫延遲時間(relaxation delay，其參數為"d1")，一般建議 $d1 > 5 \times T1$。
5. 使用"baseopt"的數位化模式(鍵入"**eda**"指令，並將參數"DIGMOD"選為"baseopt")。
6. 良好的相位調整與基線校正。

9-1. 已知濃度樣品校正

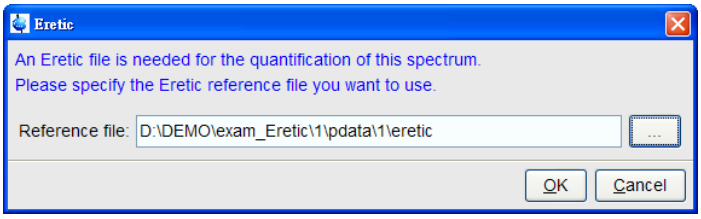
1. 完成已知濃度樣品之 ^{1}H 光譜後，由 Process 頁面點選 ∫ Integrate 按鍵進入積分模式。
2. 積分光譜中的譜峰。
3. 於欲做為標準的積分區域內壓下滑鼠右鍵，選擇"Select / Deselect"選項，或使用 按鍵，多重選取欲做為標準的積分區段。
4. 於任一已選取之積分區段內壓下滑鼠右鍵，選擇"Eretic" → "Define as Eretic Reference"，並填入樣品之相關資訊：



5. 按下 OK 後即完成已知濃度樣品校正，並建立濃度參照檔案。

9-2. 未知濃度樣品計算

1. 完成未知濃度樣品之 ^{1}H 光譜後，由 Process 頁面點選 ∫ Integrate 按鍵進入積分模式。
2. 積分欲計算濃度之譜峰。
3. 於積分區域內壓下滑鼠右鍵，選擇"Select / Deselect"選項，或使用 按鍵，多重選取欲計算濃度的積分區段。
4. 於任一已選取之積分區段內壓下滑鼠右鍵，選擇"Eretic" → "Calculate Concentration"，並填入濃度參照檔案之路徑：

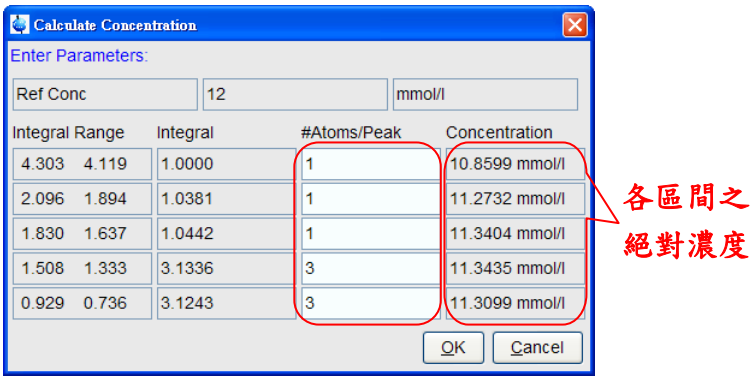


其路徑之格式為：

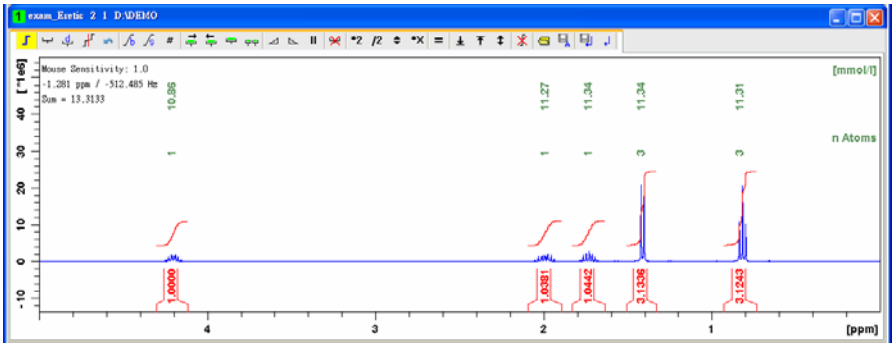
<DIR>\<NAME>\<EXPNO>\PDATA\<PROCNO>\eretic

或使用 ... 按鍵選取"eretic"檔案，再按下 OK 按鍵。

5. 填入各區間內 ^{1}H 的個數，再按下 OK 按鍵：

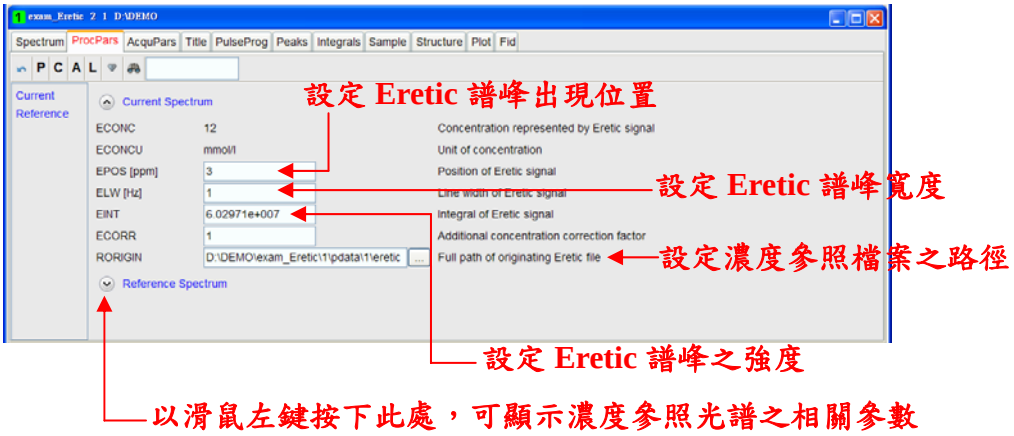


6. 出現各區間絕對濃度之數據於光譜中:

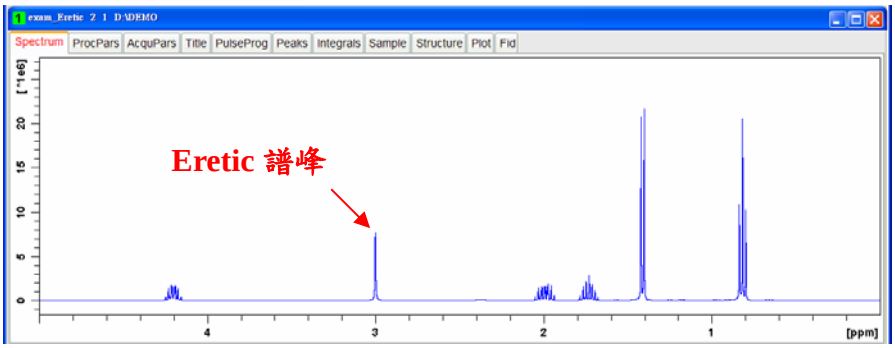


9-3. 增加 Eretic 譜峰

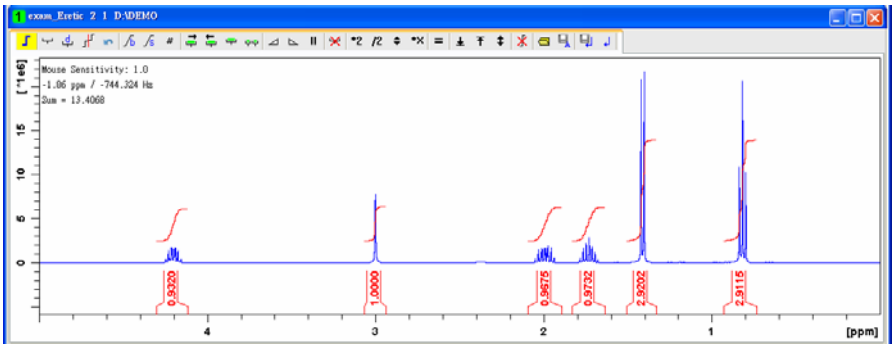
1. 選擇標籤區 ProcPars 之頁面，或鍵入"**edp**"指令，並按下 **E** 按鍵：



2. 按下 **A** 按鍵，或鍵入"**adderetic**"指令：



3. 可利用增加之 Eretic 譜峰進行積分，即可獲得濃度之相對數值：



第十章 常用指令 (Frequently Command)

- **A**

- **abs**：同時做基線修正與圖譜積分

  abs n：僅做基線修正不做自動積分(1D)
- **abs1**：進行 F1 軸的基線修正(2D)
- **abs2**：進行 F2 軸的基線修正(2D)
- **abs2D**：連續進行 F2 與 F1 軸的基線修正(2D)[註七]
- **account**：選擇並開啟收訊時間紀錄檔
- **acqu**：顯示視窗在訊號收集模式(僅在訊號收集過程中才可執行)
- **adderetic**：增加之 Eretic 譜峰
- **apk**：執行自動相位校正的動作
- **aqguide**：開啟實驗設定小幫手
- **ased**：列出執行實驗時所需的重要參數並允許修改之
- **at**：設定一指令於一個 EXPNO 在某一時間開始執行，設定之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"delayed"
- **atma**：自動對 ATM 探頭進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整
- **atmm**：於電腦螢幕上對 ATM 探頭進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整
- **atmulti**：設定一指令於多個 EXPNO 在某一時間開始執行，設定之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"delayed"
- **autolink**：開啟蛋白質骨架自動標定功能(backbone assignment)
- **autoshim on**：開啟自動勻場(autoshim)功能

  autoshim off：關閉自動勻場(autoshim)功能

- **B**

- **bnmr**：開啟 Button NMR 軟體控制視窗
- **bsmsdisp**：開啟 BSMS 控制視窗

- **C**

- **cf**：將電腦與 NMR 主機間做組態重建(需 NMR super user 密碼)
- **cmdhist**：查看所有執行過的指令
- **cmdindex**：開啟指令說明與查詢視窗
- **convertpeaklist**：轉換 XML 格式之 peaklist 檔案為 TXT 格式
- **copy**：將目前的光譜複製到 Windows 的剪貼簿
- **cron**：設定一指令於某一週期期間執行，設定之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"cron"

- **D**

- **daisy**：執行 Daisy 光譜模擬程式(1D)
- **daisyguide**：執行 Daisy 光譜模擬程式小幫手(1D)
- **dcon**：執行重疊峰拆解(deconvolution)程式
- **del**：以檔案名稱(NAME)為選擇方式刪除檔案
- **del2d**：刪除檔案中光譜處理的檔案(不會刪除 FID) (2D, 3D)
- **delmac**：刪除巨集(macro)檔案
- **delp**：刪除檔案中光譜處理的檔案(不會刪除 FID) (nD)
- **delsh**：刪除勻場檔案(shim files)
- **dir**：以實驗名稱(NAME)為選擇方式列出檔案
- **docs**：列出 TopSpin 中所有手冊
- **dpa**：顯示已執行過實驗的收訊參數檔內容
- **dpp**：顯示已執行過實驗的數據處理參數檔內容

- **E**

- **eda**：編輯收訊參數檔
- **edasp**：設定偵測核種與硬體線路的連接方式
- **edat**：開啟"Spooler"視窗中的"Scheduled jobs"頁面
- **edc**：編輯並可開啟一個新的檔案目錄
- **edc2**：指定一起進入 TOPSPIN Plot Edit 繪圖的檔案目錄
- **edcpul**：顯示目前實驗的脈衝程式
- **edcron**：開啟"Spooler"視窗中的"Cron jobs"頁面
- **edhead**：顯示並選擇探頭的資料表
- **edlev**：編輯等高線圈層數與圈數(2D, 3D)
- **edmac**：編輯一個巨集指令
- **edp**：編輯一個訊號處理參數檔
- **edprosol**：定義各種不同探頭在不同溶劑下對於各原子核種的脈衝強度與脈衝時間(需 NMR super user 密碼)
- **edpul**：顯示所有實驗的脈衝程式
- **edqu**：開啟"Spooler"視窗中的"Queued jobs"頁面
- **edte**：顯示並可設定控溫器的溫度
- **edti**：編輯一個實驗的標題
- **ef**：套用EM視窗函數並進行傅立葉轉換(1D)
- **efp**：套用 EM 視窗函數並進行傅立葉轉換及相位校正的動作(1D)
- **ej**：將樣品從磁鐵中取出
- **exit**：關閉 TopSpin
- **expl**：開啟檔案資料夾，並顯示在目前光譜的 PROCNO 位置

  expl top：開啟檔案資料夾，並顯示在 TopSpin 程式之位置

  expl home：開啟檔案資料夾，並顯示在"Documents and Settings\

使用者名稱"之檔案位置

expl +資料夾完整路徑：開啟檔案資料夾，並顯示在所指定之檔案位置

- **exportfile**：將光譜輸出成圖形檔
- **expt**：計算目前實驗所需時間

- **F**

- **fid**：開啟 FID 的顯示視窗
- **fp**：進行傅立葉轉換及相位校正的動作(1D)
- **ft**：進行傅立葉轉換(1D)
- **ft3d**：進行 F3、F2 與 F1 軸的傅立葉轉換(3D)
- **ftnd**：進行≥ 3D 光譜的傅立葉轉換
- **fromzip**：開啟以 zip 格式壓縮的 NMR 檔案

- **G**

- **getprosol**：將"**edprosol**"內所輸入的參數值讀取至目前的收訊參數檔內
- **gf**：套用 GM 視窗函數並進行傅立葉轉換(1D)
- **gfp**：套用 GM 視窗函數並進行傅立葉轉換及相位校正的動作(1D)
- **ghelp**：開啟"NMR Guide"程式
- **go**：將停止的一維實驗予以繼續執行
- **gradshim**：開啟磁場梯度勻場(gradient shimming)控制視窗
- **gradshimau**：執行磁場梯度勻場(需先做 automation 之設定)[註七]
- **gs**：開始進行實驗並可調整參數，調整參數後之結果會立即顯示

- **H**

- **ha**：顯示各項硬體連結之 IP 位置
- **halt**：暫停實驗的執行並將目前已收集的訊號儲存於硬碟

  halt+數字：將累積至設定數字掃瞄次數的 FID 內容予以暫停執行並將目前已收集的訊號儲存於硬碟
- **heater on**：開啟控溫器的加熱器進行溫度控制

  heater off：關閉控溫器的加熱器
- **help**：開啟指令說明對話框

  help+指令：出現此指令的詳細說明
- **hist**：顯示 TopSpin 程式執行時的各項紀錄檔

I

- **iconnmr**：開啟 IconNMR 程式
- **iexpno**：創造一個新的檔案，其實驗序號(EXPNO)自動加一[註七]
- **ii**：連繫軟體與硬體的設定
- **ij**：將樣品放入磁鐵中

J

- **jcp**：開啟 JChemPaint 化學結構繪製程式

K

- **kill**：刪除不欲繼續執行的程式

L

- **lock**：選擇樣品內氘溶劑的種類並執行氘鎖定
- **lockdisp**：開啟氘鎖定視窗
- **loopadj**：於已執行氘鎖定狀況下，自動調整氘鎖定的參數[註七]

- **M**

- **mana**：執行偶合常數分析程式(1D)
- **managuide**：執行偶合常數分析程式小幫手(1D)
- **multicmd**：依序執行多個相同檔名且 EXPNO 相連的指令[註七]
- **multizg**：依序進行多個相同檔名且 EXPNO 相連的實驗[註七]

- **N**

- **new**：編輯並可開啟一個新的檔案目錄，等同於"**edc**"指令
- **nmr_save**：將 TopSpin 中的重要檔案進行備份或還原[註七]
- **nmrsim**：啟動 NMR-SIM 電腦模擬應用軟體
- **ns**：設定實驗掃瞄的次數

- **O**

- **open**：開啟已經存在的實驗設定檔

- **P**

- **paropt**：對某一實驗參數做漸進式的調整[註七]
- **parwin**：自動分割視窗顯示設定光譜處理參數

  parwin tog：關閉自動分割視窗
- **peaksannotatesolvent**：自動將溶劑之譜峰標定加入"S"符號
- **peaksdropsolvent**：自動將溶劑之譜峰標定刪除
- **popt**：對某一實驗參數做漸進式的調整
- **pp**：開啟譜峰標定功能對話框
- **prguide**：開啟光譜處理小幫手
- **print**：開啟列印選項對話框
- **proj**：開啟投影圖功能對話框(2D, 3D)

- **pulsecal**：進行實驗自動找尋樣品 ^{1}H 的 90°脈衝參數[註七]

Q

- **qu**：將指令使一個 EXPNO 佇列等候執行，佇列之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"queued"
- **qumulti**：將指令使多個 EXPNO 佇列等候執行，佇列之指令數目會顯示在狀態列中"Spooler"的"queued"

R

- **r12**：從 3D 實驗資料中讀取 F1-F2 平面至 2D 實驗資料中(3D)
- **r13**：從 3D 實驗資料中讀取 F1-F3 平面至 2D 實驗資料中(3D)
- **r23**：從 3D 實驗資料中讀取 F2-F3 平面至 2D 實驗資料中(3D)
- **re**：讀取某實驗名稱或 EXPNO 的光譜資料
- **reb**：開啟已經存在的實驗資料檔
- **rel**：列出此實驗名稱下之 EXPNO 與 PROCNO 的光譜資料
- **rep**：讀取此 EXPNO 下之 PROCNO 的光譜資料
- **rga**：自動調整接收器增益值 (receiver gain，RG 值)

  rga -ds：自動調整接收器增益值並使用"ds" (dummy scan)之參數
- **ro**：啟動樣品旋轉
- **rpar**：讀取已儲存的實驗參數設定檔
- **rsc**：從 2D 光譜讀取某一縱軸(column)的光譜至 1D (2D)
- **rser**：從 2D 光譜讀取某一橫軸(raw)的 FID 至 1D (2D)
- **rsh**：讀取已儲存的勻場檔案(shim file)

  rsh acqu：讀取目前光譜於實驗時所使用的勻場數值

S

- **savelogs**：將 TopSpin 程式執行時的各項紀錄檔製成 zip 格式之壓縮檔
- **search**：尋找或開啟電腦中的 NMR 資料
- **set**：設定使用者界面
- **setres**：設定使用者界面，等同於"**set**"指令
- **setti**：編輯一個實驗的標題，等同於"**edti**"指令
- **sino**：測量訊雜比(signal-to-noise ratio)
- **smail**：將目前顯示之光譜製成 zip 格式之壓縮檔並寄出
- **spectyp**：設定光譜類型
- **spooler**：開啟"Spooler"視窗
- **stop**：停止實驗的執行但不會將目前已收集的訊號儲存於硬碟
- **sub1**：將 2D 光譜減去某一縱軸(column)的 1D 光譜(2D)
- **sub2**：將 2D 光譜減去某一橫軸(row)的 1D 光譜(2D)
- **sym**：將具有對稱性的同核 2D 光譜進行對稱化，適用於 magnitude (脈衝程式具"qf"者)之光譜
- **syma**：將具有對稱性的同核 2D 光譜進行對稱化，適用於 phase sensitive (脈衝程式具"ph"或"et"者)之光譜

T

- **tabs1**：進行 F1 軸的基線修正(3D)
- **tabs2**：進行 F2 軸的基線修正(3D)
- **tabs3**：進行 F3 軸的基線修正(3D)
- **tf1**：進行 F1 軸的傅立葉轉換(3D)
- **tf2**：進行 F2 軸的傅立葉轉換(3D)
- **tf3**：進行 F3 軸的傅立葉轉換(3D)

- **tht1**：進行 F1 軸的希爾伯特(Hilbert)轉換(3D)
- **tht2**：進行 F2 軸的希爾伯特(Hilbert)轉換(3D)
- **tht3**：進行 F3 軸的希爾伯特(Hilbert)轉換(3D)
- **topguide**：開啟光譜收集與處理工具程式
- **topshim**：執行 Z 方向自動勻場功能

  topshim 3d：對 X, Y, Z 方向執行自動勻場功能

  topshim 1h：對 ^{1}H 執行 Z 方向自動勻場功能

  topshim 2h：對 ^{2}H 執行 Z 方向自動勻場功能

  topshim gui：開啟 topshim 功能設定程式

  topshim shigemi：對 Shigemi 樣品管執行 Z 方向自動勻場功能

  topshim stop：停止自動勻場功能程式
- **tozip**：將目前顯示之光譜製成 zip 格式之壓縮檔
- **tr**：將蒐集至目前的 FID 予以存檔

  tr+數字：將蒐集至設定掃瞄次數數字的 FID 予以存檔

V

- **vconv**：將 Varian NMR 的檔案轉換成 TopSpin 可讀取之格式
- **vish**：查閱已儲存的勻場檔案(shim file)

  vish acqu：查閱目前光譜於實驗時所使用的勻場數值

W

- **wobb**：進行共振頻率(tuning)及探頭的阻抗(matching)調整
- **wobbt**：以較粗的線顯示 wobb 曲線
- **wpar**：儲存實驗參數設定檔
- **wrpa**：將目前 EXPNO 中的所有檔案複製到另一個 EXPNO
- **wsh**：將目前的勻場值(shim values)存成一個檔案

磊威科技股份有限公司
Rezwave Technology Inc.

- **X**

- **xaua**：執行在"AUNM"中設定之 AU 程式
- **xaup**：執行在"AUNMP"中設定之 AU 程式
- **vish**：查閱已儲存的勻場檔案(shim file)
- **xfb**：進行傅立葉轉換(2D)
- **xwp**：將目前光譜置入 TOPSPIN Plot Editor 程式編輯

- **Z**

- **zg**：進行實驗

※註七：此為 AU 程式之執行指令，第一次執行此類指令，電腦會先進行指令編譯(compile)的動作。

[附註] 更詳細之指令，請參考 TopSpin 中之"Commands" (由主功能表 → 中選取)